XXII Всероссийская школа - семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-22)

памяти М.И. Куркина

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

24 ноября - 1 декабря 2022 года

г. Екатеринбург

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

XXII Всероссийской школы–семинара
по проблемам физики конденсированного состояния вещества
памяти М.И. Куркина
(СПФКС–22)

24 ноября — 1 декабря 2022 года

г. Екатеринбург
2022

УДК 538.9(043.2)
ББК 22.37я431
В85

В85 XXII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества памяти М.И. Куркина (СПФКС-22), Тезисы докладов, г. Екатеринбург, 24 ноября — 1 декабря 2022г., г. Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2022, 301 с. (СПФКС-22)

ISBN 978-5-6045774-6-2

В сборнике тезисов докладов включены материалы XXII Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества памяти М.И. Куркина (СПФКС-22). Место проведения — г. Екатеринбург и б/о «Солнечный остров», с. Мостовское. Время проведения 24 ноября — 1 декабря 2022г.

Ответственные за выпуск — Гудин С.А., Сташков А.Н.

Технический редактор — Игошев П.А.

ISBN 978-5-6045774-6-2

© Авторы, содержание тезисов, 2022
© ИФМ УрО РАН, оформление, 2022

Памяти Куркина Михаила Ивановича

Михаил Иванович Куркин
13.08.1938 — 19.01.2022

19 января 2022 года на 84 году жизни после тяжелой болезни скончался Михаил Иванович Куркин – известный специалист в области физики конденсированного состояния вещества, доктор физико-математических наук, профессор, автор 137 научных статей. М.И. Куркин родился 13 августа 1938 г. в городе Москве. Закончив с отличием в 1960 г. физический факультет Уральского государственного университета им. А.М. Горького, он поступил в аспирантуру Института физики металлов АН СССР. В этом институте Михаил Иванович проработал всю свою жизнь. Его кандидатская (1968 г.) и докторская (1979 г.) диссертации защищены по работам, связанным с теорией ядерного магнитного резонанса в магнитоупорядоченных веществах. Полученные в этой области результаты обобщены в совместной с член-корр. РАН Е.А. Туровым монографии. Михаил Иванович Куркин с 1988 г. по 1996 г. руководил отделом теоретической физики, с 1996 г. по 2005 г. являлся заведующим лабораторией теоретической физики, с 2005 г. по 2022 г. был главным научным сотрудником ИФМ УрО РАН. М.И. Куркин в течение многих лет читал лекции для студентов Уральского государственного университета им. А.М. Горького, был членом диссертационного совета при ИФМ УрО РАН и ГЭК при УГТУ-УПИ.

Полученные им теоретические результаты внесли значительный вклад в развитие радиофизики метрового и дециметрового диапазона, квантовой магнитоакустики, фемтосекундной магнитооптики, в описание аномальных электрических свойств веществ с магнитным упорядочением и диффузионных явлений в материалах с наномасштабными неоднородностями атомной структуры. Построенная им теория сигналов эха в условиях существования ядерных спиновых волн использовалась в Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе (г. Ленинград) при разработке спиновых процессоров для управления и обработки радиосигналов, применяемых в космической радиосвязи. При участии М.И. Куркина в Институте физических проблем им. П.Л. Капицы было обнаружено новое физическое явление – одноимпульсное спиновое эхо. Результаты М.И. Куркина использовались в Казанском физико-техническом институте им. Е.К. Завойского (г. Казань) при разработке акустических устройств для авиационной техники. Он объяснил и теоретически описал явление гигантского магнитоакустического эффекта. М.И. Куркин обеспечивал теоретическое обоснование экспериментальных исследований диффузионных явлений в межкристаллитных областях, имеющих нанометровые размеры. В последние годы М.И. Куркин работал над проблемами теоретического описания аномальных электрических свойств магнитных материалов, разрабатываемых для улучшения характеристик устройств хранения информации в вычислительной технике и сверхчувствительных датчиков магнитного поля. М.И. Куркин - один из основных авторов теории косвенных обменных взаимодействий, объясняющей специфические магнитные свойства мультислоев железо-хром, необходимых для существования в них гигантского магнитосопротивления. Он предложил механизм формирования магнитоэлектрических эффектов при участии электроактивных оптических фононов. Ему принадлежит идея описания процессов сверхбыстрой магнитной динамики при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов, основанная на эффекте оптического размораживания орбитального магнетизма.

Жизнь Михаила Ивановича была неразрывно связана с Международной школой физиков-теоретиков «Коуровка», в которой он принимал участие с первой школы, много лет входил в состав оргкомитета и программного комитета, был председателем оргкомитета «Коуровка-2004».

В 2011 году М.И. Куркин был удостоен Государственной премии Республики Татарстан в области науки и техники за исследование эффектов квантовой магнитоакустики и разработку

технических устройств на их основе. В 2013 г. награжден медалью ордена «за заслуги перед Отечеством» II степени.

Светлая память о выдающемся ученом и прекрасном человеке навсегда останется в наших сердцах.

Организаторы

* 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»

Финансовая поддержка

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

Оргкомитет

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

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)
* 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
* Прудников П.В., д.ф.-м.н., ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
* 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

* **Хотиенкова М.Н., ИТФ УрО РАН (председатель локального комитета)**
* Ширинкина И.Г., к.т.н., ИФМ УрО РАН (зам. председатель локального комитета)
* Гапонцева Н.Н., ИФМ УрО РАН
* Девятериков Д.И., ИФМ УрО РАН
* Заяц С.В, ИЭФ УрО РАН
* Панасенко А.С., ИТФ УрО РАН
* Постников М.С., ИФМ УрО РАН

Сайт СПФКС — https://spfks.imp.uran.ru
e–mail — spfks@imp.uran.ru

Содержание

Памяти М. И. Куркина **3**

Вступительная статья **25**

М.И. Куркин. Вступительная статья к сборнику тезисов СПФКС-5 **31**

С.А. Гудин. Уникальный человек **33**

Н.Н. Гапонцева. Мои воспоминания о Михаиле Ивановиче **39**

О Куркине М.И. от Орловой (Бакулиной) Н. Б. **41**

С.М. Куркин. Куркин Михаил Иванович. Воспоминания сына **43**

М.И. Куркин. Когда правильно отмечать день Великой Октябрьской Социалистической революции **47**

Аналитический отчет о XXI Всероссийской школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-21) **51**

Лекции **59**

Магнитокалорический эффект в переменных магнитных полях, *Алиев А.М.* 61

Спектральные потоки и монополи Берри-Черна в эрмитовых и неэрмитовых топологических системах, *Алисултанов З.З.* 62

Стекольный переход как топологический фазовый переход в упругой среде, *Васин М.Г., Шкляев К.Я.* 63

Проект компактного источника нейтронов DARIA для исследований методами нейтронного рассеяния, *Григорьев С.В.* 64

Теория косвенных обменных взаимодействий в гетероструктурах Fe/Cr с эффектом гигантского магнитосопротивления, *Гудин С.А.* 65

Современные нанокомпозитные магнитные материалы для терапии и диагностики рака, *Дёмин А.М.* 66

Спиновая диаграммная техника в задачах аналогового квантового моделирования, *Елистратов А.А.* 67

Фундаментальные основы создания новых ниобийсодержащих материалов для металлургии, *Заякин О.В.* 68

Сверхпроводящие материалы для криомагнитного охлаждения и магнитолевитационного транспорта, *Каманцев А.П., Карпухин Д.А., Коледов В.В., Терентьев Ю.А.* 69

Кривая намагничивания и зонный ферромагнетизм, *Королев А.В.* 70

Разнообразие эффектов Холла, *Кунцевич А.Ю.* 71

Запутанные состояния в коррелированных квантовых точках, *Манцевич В.Н., Маслова Н.С.* 72

Диэлектрическая проницаемость нанокомпозитов металл-диэлектрик, *Некрасов И.А.* 73

Кинетика параметрического усилителя бегущей волны: описание на основе диаграммной техники Швигера-Келдыша, *Ремизов С.В., Елистратов А.А.* 74

Термоупругие мартенситные превращения и эффекты памяти формы в сплавах, *Реснина Н.Н.* 75

Структурная наследственность в металлургических расплавах, *Рыльцев Р.Е., Камаева Л.В., Щелкачев Н.М.* 76

Спин-орбитальное расщепление в двумерных системах, *Тарасенко С.А.* 77

Материалы с нецентросимметричными кристаллическими структурами на основе интеркалатов, *Титов А.Н., Шкварин А.С., Меренцов А.И., Постников М.С., Шкварина Е.Г., Титов А.А., Дьячков Е.Г.* 78

Исследование уравнений состояния тугоплавких материалов при высоких температурах, *Хищенко К.В.* 79

Структурное наследование и машинное обучение для дизайна новых материалов, *Щелкачев Н.М., Рыльцев Р.Е.* 80

Релятивистские СВЧ-генераторы с потоками излучения высокой мощности в зоне взаимодействия и в свободном пространстве, *Яландин М.И.* 81

Плазмоника для систем терагерцовой электроники, *Муравьев В.М., Кукушкин И.В.* . 82

Магнитные явления **83**

Влияние частичного замещения Fe на Mn на магнитные и магнитокалорические свойства сплава $LaFe_{11.2}Co_{0.7}Si_{1.1}$, *Абдулкадирова Н.З., Гамзатов А.Г., Камилов К.И., Алиев А.М., Gebara P.* 85

Структура, диэлектрические свойства и рамановская спектроскопия наночастиц шпинели Zn – Cd, *Абухасва А.С., Бадр М.Х., Хассан М.А., Мустафа М., Раммах Ю.С., Эль-Хамалави А.А.* 86

Влияние термообработки на структурные параметры тонких пленок NiO, *Артемьев М.С., Изюров В.В., Меренцова К.А., Десятников И.А., Дубинин С.С., Носов А.П.* 87

Визуализация векторного поля системы магнитов по магнитооптическим изображениям, *Богуславский Л.Г., Иванов В.Е., Фещенко А.А., Андреев С.В., Лепаловский В.Н.* 88

Особенности гистерезисных свойств и магнитной анизотропии тонких плёнок Ni, *Быкова А.А., Горьковенко А.Н., Кулеш Н.А., Васьковский В.О.* 89

Электрические и магнитные свойства $\alpha'' - (Cd_{1-x}Mn_x)_3As_2$ и 20 мол.% MnAs ($x = 0.08$), *Сайпулаева Л.А., Алиев А.М., Гаджиалиев М.М., Гаджиев А.М., Риль А.И., Маренкин С.Ф.* 90

Температурно-частотные зависимости магнитокалорического эффекта вблизи T_C в сплавах $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{22-x}(Cu,Zn)_x$, *Гамзатов А.Г., Алиев А.М.* 91

Форма микрообъекта как управляющий фактор при изменении оси однонаправленной магнитной анизотропии в спиновых клапанах, *Гермизина А.А., Наумова Л.И., Миляев М.А., Павлова А.Ю., Максимова И.К., Проглядо В.В.* 92

Анизотропия магнитокалорического эффекта в монокристалле MnAs, *Говорина В.В., Амиров А.А., Сташкова Л.А., Незнахин Д.С.* 93

Влияние инфильтрации легкоплавких добавок на гистерезисные магнитные свойства сплава MQP-B, *Голубятникова А.А., Шалагинов А.Н., Мальцева В.Е., Андреев С.В., Волегов А.С.* 94

Гистерезисные свойства и динамика магнитных доменных границ в монокристалле феррита-граната в области температуры магнитной компенсации, *Гуляев К.Е., Растрепенина Н.С., Лысов М.С., Мехоношин Д.С., Памятных Л.А.* 95

Первопринципные расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика $CrNb_3S_6$, *Евсин Д.В., Борзилов В.О., Мамонова М.В., Прудников П.В.* 96

Изменение магнитотранспортных свойств спиновых клапанов на основе обменно-связанных слоев хирального магнетика Dy и сплава $Co_{90}Fe_{10}$ в процессе интердиффузии, *Заворницын Р.С., Наумова Л.И., Миляев М.А., Макарова М.В., Проглядо В.В., Русалина А.С., Устинов В.В.* 97

Детектор магнитного поля на основе магнитоуправляемого спинового светодиода, *Здоровейщев А.В., Ведь М.В., Дорохин М.В., Дёмина П.Б., Здоровейщев Д.А., Дудин Ю.А., Котомина В.Е.* 98

Магнитные и магнитокалорические свойства ленточного образца сплава Гейслера $Ni_{45}Co_5Mn_{31}Al_{19}$: экспериментальные и теоретические исследования, *Кадырбардеев А.Т., Гамзатов А.Г., Алиев А.М., Соколовский В.В.* 99

Магнитные свойства $(R_{1-x}Y_x)(Co_{0.84}Fe_{0.16})$, где $R = Dy, Ho, Tm$ с метамагнитными переходами, *Аникин М.С., Тарасов Е.Н., Князев М.И., Зинин А.В.* 100

Исследование влияния поверхностно-активных добавок на вибрационное измельчение и свойства спеченных магнитов сплава Nd-Fe-B, *Кручинина К.А., Головня О.А., Протасов А.В., Колодкин Д.А., Попов А.Г., Шитов А.В., Таранов Д.В., Огурцов А.В., Шарин М.К.* 101

Влияние обработки ацетоном на изменение магнитных характеристик аморфного магнитомягкого сплава на основе кобальта с течением времени, *Лигус А.А., Некрасов Е.С., Скулкина Н.А.* 102

Теоретические расчеты магнитной анизотропии в трехслойных металлических наноструктурах в зависимости от толщины слоев, *Мамонова М.В., Макеев М.Ю.* . . .103

Теоретические исследования структурных и магнитных свойств сплавов Fe – Ga, *Матюнина М.В., Загребин М.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.* 104

Магнитоимпедансный эффект в аморфных магнитомягких проводах и радиальное распределение магнитной проницаемости: моделирование и эксперимент, *Мацюк И.М., Деревянко М.С., Букреев Д.А.* 105

Магнитокалорический эффект в сплавах Gd_xPd_{1-x} в циклических магнитных полях, *Мухучев А.А., Алиев А.М., Franco V.* 106

Изменение магнитных характеристик аморфного магнитомягкого сплава на основе кобальта в результате низкотемпературного отжига, *Некрасов Е.С., Скулкина Н.А.* 107

Магнитные свойства соединений CoNi, FeNi, MnAl, MnGa, *Новокрещенов Д.В., Соколовский В.В.* 108

Спиновое состояние железа и спиновые переходы в интеркалированных и замещенных слоистых соединениях Fe_xTaCh_2 и $Fe_xTa_{1-x}Ch_2 (Ch = S, Se)$, *Носова Н.М., Селезнева Н.В., Баранов Н.В.* 109

Устойчивость магнитных скирмионов: исследование влияния размера от нанометров до микронов, *Поткина М.Н., Лобанов И.С., Йонссон Х.* 110

Характер межслойных связей в двумерных материалах, *Пушкарев Г.В., Мазуренко В.Г., Мазуренко В.В., Бухвалов Д.В.* 111

Структурные и магнитные свойства пленок Co/X/Co(X = W, Gd), *Русалина А.С., Свалов А.В., Курляндская Г.В.* 112

Магнитокристаллическая анизотропия сплавов Гейслера на основе Co – Ni – Z, *Саносян А.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.* 113

Влияние температуры подложки на эффект обменного смещения в пленках $Ta/Cr_{70}Mn_{30}/Fe_{20}Ni_{80}/Ta$, *Северова С.В., Фещенко А.А., Москалев М.Е., Лепаловский В.Н., Горьковенко А.Н., Васьковский В.О.* 114

Новые парамагнитные центры в ионно-имплантированных керамиках $MgAl_2O_4$: C, *Ситдиков Л.В., Зацепин А.Ф., Киряков А.Н., Щапова Ю.В., Байтимиров Д.Р., Конев С.Ф., Гаврилов Н.В.* 115

Кристаллическая структура и магнитные свойства смешанновалентного комплекса $LiMn^{2+}Mn^{3+}TeO_6$, *Суслопарова А.Е., Курбаков А.И.* 116

Структурные особенности и электрические свойства пленок $Ta/Cr_{100-x}Mn_x/Ta$, *Фещенко А.А., Москалев М.Е., Лепаловский В.Н., Горьковенко А.Н., Кравцов Е.А., Васьковский В.О.* 117

Влияние долговременного воздействия циклических полей на магнитные свойства сплава $Ni-Mn-In$, *Ханов Л.Н., Алиев А.М., Маширов А.В., Каманцев А.П.* 118

Влияние межзеренного обменного взаимодействия на обратимую магнитную восприимчивость нанокристаллических сплавов $Nd-Fe-B$, *Шалагинов А.Н., Андреев С.В., Мальцева В.Е., Голубятникова А.А., Волегов А.С.* 119

Эффективная магнитная модель для описания монослоя Fe_3GeTe_2, *Яковлев И.А., Пушкарев Г.В., Бадртдинов Д.И., Мазуренко В.Г., Мазуренко В.В., Руденко А.Н.* 120

Фазовые переходы и критические явления **121**

Влияние замещений в катионной и анионной подрешетках Co_7Se_8 на физические свойства, *Акрамов Д.Ф., Селезнева Н.В., Кузнецов Д.К., Баранов Н.В.* 123

Анализ предпереходных явлений в сплавах систем $Ni-Mn$, $Ni-Mn-Ti$, $Ni-Mn-Al$, $Ni-Mn-Ga$, *Белослудцева Е.С., Пушин В.Г., Стукалов В.Ю.* 124

Моделирование критического поведения однородной и неупорядоченной трехмерной модели Изинга, *Бражник В.В.* 125

Переохлаждение расплавов Al-Cu-Co при 15 ат.% Co в условиях медленного охлаждения в контейнере, *Бронникова Ю.И., Камаева Л.В., Ладьянов В.И.* 126

Динамика водородных связей в воде в окрестности перехода «жидкость-жидкость», *Власов Р.В., Мокшин А.В.* 127

Индуцирование сверхпроводимости в антиферромагнитном $Fe_{1.1}Te$ при допировании дисульфидом титана, *Кислов Е.В., Селезнева Н.В., Баранов Н.В.* 128

Физические свойства соединений $Fe_{1-\delta}Se$ ($\delta = 0.125, 0.25$) с замещением диспрозием по катионной подрешетке, *Комарова В.А., Мозговых С.Н., Шерокалова Е.М., Селезнева Н.В.* 129

Прогнозирование роста аустенитного зерна сталей с карбонитридным упрочнением, *Корзунова Е.И., Горбачев И.И.* 130

Изучение электронной структуры и критических точек в системе Ti_xTiSe_2 в сравнении с системой Fe_xTiSe_2, *Кузнецова А.Ю., Суслов Е.А., Титов А.Н.* 131

TEM и HRTEM исследование фазового расслоения в $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$, *Кузнецов Д.Д., Маширов А.В., Кузнецова Е.И., Лошаченко А.С., Данилов Д.В., Шандрюк Г.А., Коледов В.В., Шавров В.Г.* 132

Трехвершинная модель Поттса с конкурирующими взаимодействиями на объемно-центрированной кубической решетке, *Курбанова Д.Р., Муртазаев К.Ш., Рамазанов М.К., Магомедов М.А., Муртазаев А.К.* 133

Температуры фазовых равновесий и процессов кристаллизации расплавов Al–Cu–Co при 25 ат. % Cu, *Латыпов Т.И., Камаева Л.В., Щелкачев Н.М.* 134

Моделирование гистерезисных явлений в мультислойных магнитных структурах, *Льготина Д.А., Прудников П.В.* 135

Учет влияния эффектов анизотропии при моделировании мультислойных магнитных структур, *Минькова А.В., Прудников П.В.* 136

Спонтанные и индуцированные полем магнитные фазовые превращения и аномалии физических свойств в слоистом соединении $Fe_{6.5}Cr_{0.5}Se_8$, *Мозговых С.Н., Баранов Н.В., Волегов А.С., Шерокалова Е.М., Казанцев В.А., Селезнева Н.В.* 137

Применение термомеханических свойств Ti_2NiCu в современных технологиях, *Морозов Е.В., Коледов В.В., Шавров В.Г., Шеляков А.В., Антонов Р.А., Каманцев А.П.* 138

Влияние интеркалации кобальта на эффективную массу электрона при электрохимическом титровании Na-$Co_n TiSe_2$, *Онищенко А.О., Кузнецова А.Ю., Суслов Е.А., Постников М.С., Титов А.Н.* 139

Эволюция микроструктуры и свойств упорядоченного сплава Cu-56 ат.% Au под влиянием пластической деформации, *Подгорбунская П.О., Антонова О.В., Новикова О.С., Гаврилова А.А., Волков А.Ю.* 140

Переход полупроводник — металл и поглощение света в тонких плёнках диоксида ванадия, *Пыжьянов Я.Я., Телегин А.В., Мостовщикова Е.В.* 141

Изменения зарядовой подсистемы в зависимости от типа антиферромагнитного упорядочения в двойных манганитах $LnBaMn_2O_6$ ($Ln = Nd_{1-x}Sm_x$), *Пыжьянов Я.Я., Мостовщикова Е.В., Стерхов Е.В., Титова С.Г.* 142

Ориентационные переходы в жидкокристаллической суспензии спиралевидных магнитных частиц при слабой сегрегации, *Сокольчик Д.П., Макаров Д.В.* 143

Изучение критических точек и электронной структуры системы Cu_xZrSe_2 с применением метода ЭДС, *Суслов Е.А., Постников М.С., Титов А.А., Титов А.Н.* 144

Изучение электронной структуры и критических точек системы Ni_xTiSe_2 методом ЭДС, *Суслов Е.А., Постников М.С., Сумников С.В., Титов А.Н.* 145

Исследование плоскостной анизотропии в трехслойной структуре Co/Cu/Co, *Сухачев Р.А., Мамонова М.В.* 146

Исследование однокомпонентной системы Леннард-Джонса при низких скоростях охлаждения методами молекулярной динамики и регрессионного анализа, *Фархутдинов А.Р., Мокшин А.В.* 147

Семейство сферически-симметричных потенциалов для описания взаимодействия молекул воды, *Хабибуллин Р.А., Мокшин А.В.* 148

Процессы структурообразования в фуллереновых смесях, *Хайруллина Р.Р., Хуснутдинов Р.М.* 149

Исследование влияния дефектов различных типов на эффекты гистерезиса в мультислойных наноструктурах, *Шакиров Р.С., Прудников П.В.* 150

Численное исследование эффектов старения в тонких гейзенберговских пленках, *Шляхтич М.А., Прудников П.В.* 151

Фрустрированные фазовые состояния и псевдокритические свойства низкоразмерной модели Изинга с заряженными примесями, *Ясинская Д.Н., Панов Ю.Д.* 152

Проводимость и транспортные явления **153**

Жидкость Латтинджера с притяжением и одной примесью: точное решение, *Афонин В.В.* 155

О точном решении для одномерного проводящего канала с примесью, *Афонин В.В., Петров В.Ю.* 156

Влияние засветки на электропроводность в топологическом изоляторе на основе квантовой ямы теллурида ртути, *Галиуллин А.А., Соболевский О.А., Михайлов Н.Н., Дворецкий С.А., Кунцевич А.Ю.* 157

Влияние добавок MnTe на термоэлектрические свойства SiGe p-типа, *Голикова М., Иванова А., Новицкий А., Ховайло В.В.* 158

Синтез и структура серебряных форм полисурьмяной кислоты с различной степенью замещения, *Ярошенко Ф.А., Силова А.Е., Голованова А.И., Лупицкая Ю.А.* 159

Синтез и электрические свойства интеркалированных твёрдых растворов $Cr_xZr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$, *Меренцов А.И., Пряничников С.В., Шкварина Е.Г.* 160

Квантовые осцилляции холловской проводимости в квазидвумерных металлах, *Могилюк Т.И., Григорьев П.Д.* 161

Спин-орбитальное расщепление в квантовых ямах CdHgTe с нормальной и инвертированной зонной структурой, *Пакулов А.О., Гудина С.В., Туруткин К.В., Неверов В.Н.* 162

Определение эффективного g-фактора в метаморфных гетероструктурах InGaAs/InAlAs с высоким содержанием InAs в наклонных магнитных полях, *Сандаков Н.С., Гудина С.В., Неверов В.Н., Боголюбский А.С., Туруткин К.В., Якунин М.В.* 163

Особенности электрических, магнитных и гальваномагнитных свойств сплавов Mn_3Z, *Семянникова А.А., Ирхин В.Ю., Коренистов П.С., Терентьев П.Б., Марченкова Е.Б., Марченков В.В.* 164

Возникновение разности потенциалов вследствие неэквивалентности контактов в режиме квантового эффекта Холла, *Туруткин К.В., Гудина С.В., Неверов В.Н.* 165

Сенсорные характеристики наноструктурированной пленки CuO к этанолу, *Федоров Л.Ю., Ушаков А.В., Карпов И.В.* 166

Электрические и гальваномагнитные свойства полуметалла Вейля WTe_2, *Фоминых Б.М., Перевалова А.Н., Наумов С.В., Подгорных С.М., Чистяков В.В., Марченкова Е.Б., Марченков В.В.* 167

Термоэлектрические свойства композита на основе скуттерудита n-типа, *Чернышова Е.В., Новицкий А.П., Сергиенко И.А., Воронин А.И., Ховайло В.В.* 168

Квантовые интерференционные вклады в проводимость в структурах InGaAs/GaAs, *Шишкин М.А., Гудина С.В., Неверов В.Н.* 169

Резонансные явления **171**

Применение ядерно-резонансных методов для изучения структурных и магнитных свойств наночастиц, *Гермов А.Ю., Прокопьев Д.А., Конев А.С., Голобородский Б.Ю., Курмачев И.А., Суворкова Е.В.* 173

Структурные и механические свойства твёрдых тел **175**

Многомасштабное моделирование сдвиговой прочности Al-Cu сплава, насыщенного водородом, *Безбородова П.А., Красников В.С., Майер А.Е.* 177

Структурные особенности монокристаллов LaB_6 при температурах ниже 300 K, *Гридчина В.М., Хрыкина О.Н., Болотина Н.Б.* 178

Образование интерметаллидных фаз в кобальтовых жаропрочных сплавах, *Давыдов Д.И.* 179

Фазовая устойчивость $CuZrSe_2$ при нагреве $in-situ$, *Шкварина Е.Г., Постников М.С., Шкварин А.С., Дьячков Е.Г., Титов А.Н.* 180

Структурные свойства $Fe_xNi_yTiSe_2$, *Дьячков Е.Г., Титов А.А., Шкварин А.С., Титов А.Н.* 181

Применение сканирующей туннельной микроскопии для исследования зёренной структуры в ультрамелкозернистом ниобии, *Истомина А.Ю., Столбовский А.В., Блинов И.В., Фалахутдинов Р.М., Чикунова Н.С., Мурзинова С.А.* 182

Исследование внутреннего трения в поликристаллах оксида галлия резонансным методом на частоте 100 кГц, *Моругин Е.С., Спиридонов В.А., Панов Д.Ю., Калганов Д.А.* 183

Структура порошкового сплава TiNi после электронно-пучковой обработки, *Кафтаранова М.И., Аникеев С.Г., Артюхова Н.В., Ходоренко В.Н., Мамазакиров О.Р., Волочаев М.Н., Пахолкина С.А., Шабалина А.В.* 184

Структурные изменения в высокоазотистой аустенитной стали после горячей пластической деформации, *Ким А.В., Аккузин С.А., Литовченко И.Ю., Кушнерева Д.С.* 185

Кинетика твердофазных реакций восстановления металлов из вторичной пыли дуговых электропечей, *Коваленко Л.Ю., Анзулевич А.П., Калганов Д.А.* 186

Сверхтвердые смесевые бориды переходных металлов со структурой типа WB_{5-x}, *Мацокин Н.А., Квашнин А.Г.* 187

Исследование механических свойств образцов пористого нитинола с разной морфологией, *Никифоров Г.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.* 188

Дефектность в медной подрешетке в твердых растворах $CuCr_{1-x}Zr_xSe_2$, *Постников М.С., Титов А.А., Пряничников С.В., Титов А.Н.* 189

Устойчивость леннард-джонсовского ГЦК кристалла при отрицательных давлениях, *Розанов Е.О., Проценко С.П., Байдаков В.Г.* 190

Синтез и строение кристаллов в тройной системе $CsCl - CuCl_2 - H_2O$, *Сидорова Е.В., Смирнова Е.С., Коморников В.А., Алексеева О.А.* 191

Применение эмиссионной мессбауровской спектроскопии на ядрах ^{57}Co для исследования границ зёрен поликристаллического никеля, *Столбовский А.В., Кузнецов Д.Д., Чикунова Н.С., Мурзинова С.А., Фалахутдинов Р.М., Истомина А.Ю.* .192

Кристаллическая структура дихалькогенидов титана Co_xTiS_2 $(x = 0.1, 0.2)$, *Урусова Н.В., Меренцов А.И., Бушкова О.В.* 193

Упругие свойства редкоземельных станнатов $R_2Sn_2O_7$ $(R = La - Lu)$: *ab initio* расчет, *Чернышев В.А., Глухов К.И., Агзамова П.А.* 194

Исследование поверхности электрохимического травления ультрамелкозернистого никеля, полученного кручением под высоким давлением, с помощью сканирующей туннельной микроскопии, *Чикунова Н.С., Столбовский А.В., Мурзинова С.А., Фалахутдинов Р.М., Блинов И.В., Истомина А.Ю.* 195

Теплофизические, электронные и оптические свойства газогидратов: результаты *ab-initio* моделирования, *Юнусов М.Б., Хуснутдинов Р.М.* 196

Неразрушающий контроль **197**

Анизотропия магнитных свойств образцов из коррозионно-стойкой стали GP1, изготовленных с помощью селективного лазерного сплавления, *Гордеев Н.В., Сташков А.Н., Щапова Е.А.* 199

Оперативная диагностика фазового состава и выявление анизотропии магнитных свойств в изделиях из аустенитных коррозионно-стойких сталей, *Кочнев А.В., Ригмант М.Б., Корх М.К.* 200

Магнитные свойства образцов из стали 09Г2С, изготовленных с помощью лазерного 3*D*-принтера, до и после малоцикловых испытаний, *Сташков А.Н., Щапова Е.А., Гордеев Н.В., Ничипурук А.П.* 201

Теплофизика **203**

Капиллярная постоянная и поверхностное натяжение растворов гелия и водорода в *н*-бутане, *Андбаева В.Н.* 205

Уравнение состояния вольфрама вблизи фазового перехода жидкость — пар, *Боярских К.А., Хищенко К.В.* 206

Интенсификация теплообмена в разделяющемся водном растворе олигомера и при вскипании воды, *Волосников Д.В., Поволоцкий И.И., Скрипов П.В.* 207

Настройка рабочей точки интерферометра Фабри-Перо в установке импульсного лазерного нагрева твердых тел при низких температурах, *Котов А.Н., Старостин А.А., Шангин В.В., Бобин С.Б.* 208

Изучение фронта испарения перегретого н-пентана в стеклянном капилляре при помощи скоростной видеосъемки в двух взаимно перпендикулярных направлениях и быстродействующего датчика давления, *Липнягов Е.В., Паршакова М.А.* 209

Изучение кинетики вскипания перегретого *н*-пентана в стеклянной трубке при помощи скоростной видеосъемки в двух взаимно перпендикулярных направлениях, *Паршакова М.А., Липнягов Е.В.* 210

Методы управляемого импульсного нагрева для изучения свойств и тепловой проводимости многокомпонентных систем, *Поволоцкий И.И., Волосников Д.В., Скрипов П.В.* 211

Расчет ударных адиабат сплавов вольфрам-никель-медь при высоких давлениях, *Середкин Н.Н., Хищенко К.В.* 212

Капиллярная постоянная раствора изобутан-водород, *Хотиенкова М.Н., Андбаева В.Н.* 213

Вторичное измельчение капель мазута и водомазутной композиции при соударениях между собой и с твердой стенкой, *Шлегель Н.Е., Стрижак П.А.* 214

Электрофизика **215**

Создание модельных индукторных систем на основе образцов нанокомпозита медь-ниобий, полученных магнитно-импульсным прессованием порошков, *Заяц С.В., Спирин А.В., Паранин С.Н.* 217

Исследование электрофизических свойств пыли сталеплавильных дуговых печей при карботермическом восстановлении, *Анзулевич А.П., Коваленко Л.Ю., Павлов Д.А., Калганов Д.А.* 218

Исследование поведения композитного материала на основе наноструктурного сплава Cu-Nb в условиях генерации сильных импульсных магнитных полей, *Крутиков В.И., Паранин С.Н., Спирин А.В., Зайцев Е.Ю.* 219

Диффузия сильных магнитных полей в хрупкий цилиндрический проводник, *Русских П.А.* 220

Наноматериалы **221**

Монослой C_2N как перспективный материал для хранения водорода: DFT моделирование, *Алантьев К.В., Аникина Е.В.* 223

Применение сканирующей туннельной микроскопии для исследования низкоразмерных и слоистых систем, *Беляев Д.В., Кузнецова Т.В.* 224

Синтез и магнитные свойства нанопроводов $3d$-переходных металлов в тонкопленочной матрице оксида алюминия, *Верясова А.А., Дрягина А.Е., Горьковенко А.Н., Кулеш Н.А., Васьковский В.О.* 225

Синтез и магнитные свойства нанокомпозиционных материалов на основе металлических нанопроводов в полимерной матрице, *Дрягина А.Е., Кудюков Е.В., Горьковенко А.Н., Кулеш Н.А., Васьковский В.О.* 226

Электронное строение и оптические свойства систем $C_{60}(CF_3)_{10}$ и $C_{70}(CF_3)_{10}$ с учетом внутриузельного кулоновского взаимодействия π-электронов, *Мурзашев А.И., Жуманазаров А.П.* 227

Температурные зависимости параметров мессбауэровских спектров тонких пленок $YFeO_3$., *Изюров В.В., Носов А.П., Меренцова К.А., Артемьев М.А., Десятников И.А., Дубинин С.С.* 228

Самоорганизация массива квантовых точек на поверхности теллурида висмута, *Кахраманов С.Ш., Абдуллаев Ю.А., Бадалова З.И., Алигулиева Х.В., Оруджова Х.В., Ахмедов Г.М., Абдуллаев Н.А.* 229

Синтез, морфология и оптоэлектронные свойства нанокерамик $MgAl_2O_4$:Графен, *Киряков А.Н., Зацепин А.Ф., Дьячкова Т.В., Тютюнник А.П., Щапова Ю.В.* 230

Собственные магнитные топологические изоляторы и их контакты с различными металлами, *Климовских И.И., Естюнин Д., Шикин А.М.* 231

Лазерно-индуцированная печать графена для приложений в электронике, *Комленок М.С., Курочицкий Н.Д., Пивоваров П.А., Рыбин М.Г.* 232

Первопринципные расчёты магнитной анизотропии гетероструктуры Fe/Pt/Fe с учетом релаксации поверхности, *Макеев М.Ю., Мамонова М.В.* 233

Зависимость фазового состава тонких пленок гематита от температуры термообработки, *Меренцова К.А., Изюров В.В., Артемьев М.А., Десятников И.А., Дубинин С.С., Носов А.П.* 234

Сенсорный элемент на основе сверхрешетки CoFeNi/CuIn с пленочными концентраторами магнитного потока, *Найданов И.А., Миляев М.А., Проглядо В.В., Павлова А.Ю., Гермизина А.А., Максимова И.К.* 235

Оптическое поглощение и симметрии фуллеренов на примере изомеров фуллерена C_{90}, *Мурзашев А.И., Кокурин М.Ю., Паймеров С.К.* 236

Фотосенсибилизация активных форм кислорода наночастицами диоксида титана, декорированными квантовыми точками PbS, *Перепелица А.С., Асланов С.В., Цыбенко Ф.А.* 237

Управляемая модификация атомной структуры сверхрешёток Fe/Gd с помощью гидрирования, *Рыжова А.А., Кравцов Е.А.* 238

Плёночные металлические наноструктуры для спин-орбитроники, *Суржиков Е.А., Стеблий М.Е., Огнев А.В., Самардак А.С., Телегин А.В.* 239

Модифицированный нанотубулярный TiO_2 для удаления Cr(VI) из водных растворов под действием видимого света, *Сушникова А.А., Печищева Н.В., Зайцева П.В., Рempель А.А.* 240

Механохимический синтез заполненных скуттерудитов p-типа проводимости, *Чернышова Е.В., Новицкий А.П., Сергиенко И.А., Воронин А.И., Ховайло В.В.* 241

Влияние добавок теллурида марганца на термоэлектрические свойства сплава Гейслера, *Щербакова К.А., Ханина А.С., Новицкий А.П., Сергиенко И.А., Ховайло В.В.* 242

Сверхпроводимость и физика низких температур **243**

Отличие пиннинга вихревой структуры высокотемпературных сверхпроводящих лент 2-го поколения различного состава, облученных ионами различной энергии, *Дегтяренко П.Н., Гаврилкин С.Ю., Цветков А.Ю., Овчаров А.В., Дегтяренко А.Ю.* . . .245

Сверхпроводниковая система левитации в зазоре между двумя магнитными телами, *Захаров М.С.* 246

Взаимодействие спинового и абрикосовского вихря в допированном топологическом изоляторе, *Капранов А.В., Акзянов Р.Ш., Рахманов А.Л.* 247

Особенности разработки температурного контроллера для криогенных экспериментов, *Самарин А.Н., Самарин Н.А., Богач А.В.* 248

Влияние флуктуаций на критические свойства необычных сверхпроводников в рамках вариационной теории возмущений, *Сираев Ф.М., Авдеев М.В., Прошин Ю.Н.* 249

Характеристики проводимости композиционных материалов высокотемпературный сверхпроводник YBCO — нановолокна CuO, *Федоров Л.Ю., Ушаков А.В., Карпов И.В.* 250

Оптика и спектроскопия **251**

Люминесцентные свойства легированных боратов с антицеолитной структурой, *Беккер Т.Б.* 253

Параметры энергетического распределения ловушек в дозиметрических керамиках $Al_2O_3 - BeO$, *Герасимов М.Ф., Никифоров С.В., Ананченко Д.В., Штанг Т.В.* 254

Люминесцентные свойства коллоидных квантовых точек сульфида серебра в присутствии плазмонных наностержней золота, *Гревцева И.Г., Возгорькова Е.А., Асташкина М.С., Дерепко В.Н., Брюханов А.А.* 255

Люминесцентные свойства коллоидных квантовых точек PbS, пассивированных молекулами 2-меркаптопропионовой кислоты, *Гревцева И.Г., Бормусова С.В., Сорокина К.А., Чирков К.С., Возгорькова Е.А.* 256

Гамма-резонансный фазовый анализ горных пород регионов России, *Гусейнов М.М.* 257

Дефект упаковки в структуре кристаллов ниобата лития двойного легирования, *Кадетова А.В., Токко О.В., Прусский А.И., Палатников М.Н.* 258

Детектор рентгеновского излучения на основе микроканальных пластин, *Кантур И.Э., Ярмошенко Ю.М., Долгих В.Е., Кузнецова Т.В.* 259

Влияние облучения электронами с энергией 10 МэВ на электронные свойства монокристаллов $\alpha - In_2Se_3$, *Лобанов А.Д., Корх Ю.В., Патраков Е.И., Сарычев М.Н., Иванов В.Ю., Кузнецова Т.В.* 260

Влияние облучения высокоэнергетическими электронами на электронную структуру CaF_2 по данным рентгеновской эмиссионной спектроскопии, *Маслова С.А., Ярмошенко Ю.М., Ангервакс А.Е., Рыскин А.И., Иванов В.Ю., Кузнецова Т.В.* 261

Влияние тетра-координации интеркалированной меди в Cu_xZrSe_2 на его электронную структуру, *Шкварин А.С., Меренцов А.И., Постников М.С., Титов А.Н.* 262

Преобразование дефектов I^0 в I^- в $MAPbI_3$ при легировании Eu^{2+}, *Расметьева А.В., Устинова М.И., Кухаренко А.И., Чолах С.О., Трошин П.А., Курмаев Э.З., Жидков И.С.* 263

Электронная структура перовскитов $CH_3NH_3Pb_{1-x}M_xI_3$ (M = Ca, Sr, Ba), *Расметьева А.В., Жидков И.С., Устинова М.И., Трошин П.А., Кухаренко А.И., Чолах С.О., Курмаев Э.З.* 264

Анализ спектров отражения и магнитоотражения феррит-шпинели $MnFe_2O_4$, *Суржиков Е.А., Сухоруков Ю.П., Телегин А.В.* 265

Исследование структурного состояния нелинейно-оптически активных кристаллов $LiNbO_3$ двойного легирования катионами Mg^{2+}, Zn^{2+} рентгенографическими методами, *Токко О.В., Кадетова А.В., Прусский А.И., Палатников М.Н.* 266

Кристаллическая и электронная структура Cr_xZrSe_2, *Шкварин А.С., Меренцов А.И., Постников М.С., Шкварина Е.Г., Пряничников С.В., Лебедев А.М., Чумаков Р.Г., Титов А.Н.* 267

Зонная структура структурных фрагментов в $Zr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$, *Меренцов А.И., Шкварин А.С., Постников М.С., Титов А.Н.* 268

Люминесцентные характеристики керамик Yb:YAG, *Соломонов В.И., Спирина А.В., Макарова А.С.* 269

Теория конденсированного состояния **271**

Потенциал глубокого обучения для SiO_2: разработка, переносимость, предсказательная способность, *Балякин И.А., Рыльцев Р.Е.* 273

Описание квазилокальных колебаний в аморфных твердых телах с помощью случайных коррелированных матриц, *Конюх Д.А., Бельтюков Я.М.* 274

Первопринципные исследования мартенситной фазы нанодвойниковых структур сплавов Гейслера на основе $Ni-Mn-In$ с избытком Mn, *Ерагер К.Р., Байгутлин Д.Р., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.* 275

Генерирование эффективного многоспинового обменного взаимодействия тепловыми флуктуациями в J_1-J_2 модели Гейзенберга на квадратной решетке, *Игнатенко А.Н., Ирхин В.Ю.* 276

Условия формирования ферромагнетизма трехмерной электронной системы с гигантской сингулярностью ван Хова невырожденной зоны, *Игошев П.А., Катанин А.А.* 277

Влияние поправок Бойса-Бернарди к ошибке суперпозиции базисного набора на геометрию двухслойного графена, *Каплун М.В., Аникина Е.В.* 278

Исследование электронной структуры в ряде Co содержащих изоструктурных аналогов железных сверхпроводников, *Павлов Н.С., Шеин И.Р., Перваков К.С., Некрасов И.А.* 279

Изучение одноионной магнитной анизотропии в моноионном магнетике $(PPh_4)_2[ReF_6]\cdot 2H_2O$, *Таран Л.С., Елфимова В.Ю., Стрельцов С.В.* 280

Взаимосвязь эффекта Яна-Теллера и спин-орбитального взаимодействия для t_{2g} орбиталей и тригональных колебаний, *Темников Ф.В., Стрельцов С.В., Кугель К.И., Хомский Д.И.* 281

Атомистическое моделирование сплавов Al – Cu с помощью потенциалов глубокого машинного обучения, *Хазиева Е.О., Типеев А.О., Щелкачев Н.М., Рыльцев Р.Е.* 282

Структурные особенности жидкого висмута: DFT анализ, *Цыганков А.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.* 283

Биофизика **285**

Исследование структуры фосфатидилхолиновых мембран с магнитными наночастицами $CoFe_2O_4$, *Астанина П.Н., Коплак О.В.* 287

Использование гидростатического давления и одноосного сжатия для преодоления твердосемянности у солодки, *Беляев А.Ю., Кругликов Н.А.* 288

Механические свойства и способность к насыщению водой семян лекарственных растений, *Кругликов Н.А., Беляев А.Ю., Шарова Е.А.* 289

Моделирование кластеризации ионных каналов в липидных мембранах, *Ларионов И.А.* 290

Оценка посевных качеств семян салата после барообработки, *Процив С.Д., Кругликов Н.А.* 291

Всхожесть семян укропа после барообработки, *Шаваров С.Ю., Кругликов Н.А.* 292

Влияние гидростатического давления на прорастание семян расторопши пятнистой в открытом грунте на Среднем Урале, *Шарова Е.А., Кругликов Н.А., Беляев А.Ю.* . .293

Модель организации хроматина в ядре биологической клетки по данным малоуглового рассеяния (МУР), *Яшина Е., Варфоломеева Е., Пантина Р., Байрамуков В., Ковалев Р., Федорова Н., Шнырков О., Пшеничный К., Pipich V., Radulescu A., Григорьев С.В.* 294

Авторский указатель **295**

Вступительная статья

СПФКС-22 или двадцать два — это не всегда перебор!

Честь короны шахматной — на карте!
И он от пораженья не уйдёт:
Мы сыграли с Талем десять партий —
В преферанс, в очко и на бильярде.
Таль сказал: «Такой не подведёт!»
В.С. Высоцкий, «Честь шахматной короны»

Вот и приближается СПФКС-22. Школа-семинар будет проводиться двадцать второй раз! За это время школа родилась, росла, развивалась, набирала силу и вес, повзрослела, но все еще осталась молодой. Ведь двадцать два года — это полная задора и энергии молодость. Из-за вспышки эпидемии коронавируса СПФКС-21 проходила вместо традиционного ноября весной, и возник вопрос, в какое время года проводить следующие школы. Взвесив все за и против, мы решили вернуться к проведению Школы поздней осенью, лучше сказать, в начале зимы.

В январе 2022 года оборвалась жизнь Михаила Ивановича Куркина (13.08.1938-19.01.2022). Его организм не смог победить инсульт, осложненный коронавирусом. Бережно храня память об этом уникальном человеке, выдающемся физике, увлеченном популяризаторе науки, остроумном собеседнике и острослове, мы хотим посвятить двадцать вторую школу-семинар М.И. Куркину. Одна из последних статей, написанная Михаилом Ивановичем, посвящена СПФКС. На Школе-семинаре будет проведено мероприятие, посвященное Михаилу Ивановичу, на которое приглашены близкие ему люди. Некролог и статьи о нем помещены после вступительной статьи. Здесь я хочу рассказать о том, как М.И. Куркин связан с СПФКС.

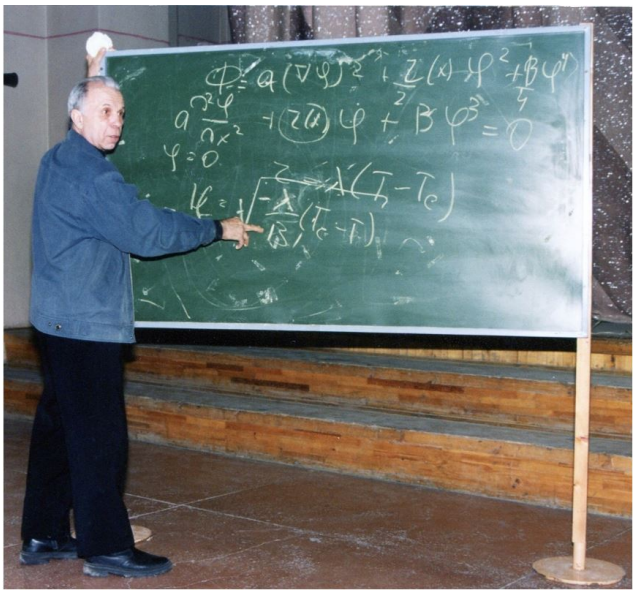


Рис. 1. М.И. Куркин, «Свойства пространства-времени и инфляционная гипотеза», доклад на СПФКС-4.

Михаил Иванович стоял у истоков создания СПФКС, был одним из ее первых лекторов и участников. Приведу выдержки из вступительной статьи к сборнику тезисов СПФКС-20, описывающие СПФКС-1, проходившую в марте 2001 г. *«Условия на базе отдыха были спартанскими. Автобус, выделенный УрО РАН, сломался, не выехав из гаража. Заменивший его ПАЗик приехал на место сбора на 1.5 часа позже и смог увезти нас на базу отдыха только за 2 рейса, при этом до самой базы отдыха он не доехал из-за распутицы, и мы с личными вещами, школьной доской, и большой коробкой с кадоскопом, которые выделил нам лектор, заведующий лабораторией теоретической физики М.И. Куркин, шли пешком около километра». «Несмотря на то, что на улице была весна, температура в жилых помещениях была в районе 10 градусов (котельная практически не грела). Кроме нас, в корпусе никто не жил, и свободных комнат было множество. Для утепления помещений окна закладывали матрасами, которые брали с пустующих кроватей. Заседания прохо-*

дили в фойе 2 этажа жилого корпуса. Хорошо помню, как, пройдя по незанятым комнатам и насобирав в них одеял, я раздавал их укутываться сидящим на заседаниях девушкам. После первой ночи треть участников уехала в Екатеринбург. Кстати, большинство оставшихся и пробывших до конца мероприятия до сих пор работают в науке, в то время как практически все уехавшие вскоре нашли себе другую работу. Еще про быт на базе отдыха. Туалет был на улице, умываться надо было в большой комнате с множеством раковин, разводка кранов которых шла от горизонтальной трубы с холодной водой, расположенной посередине комнаты, т.е. горячая вода была даже не запланирована. Но, невзирая на все это, оставшимся участникам выездной семинар понравился.

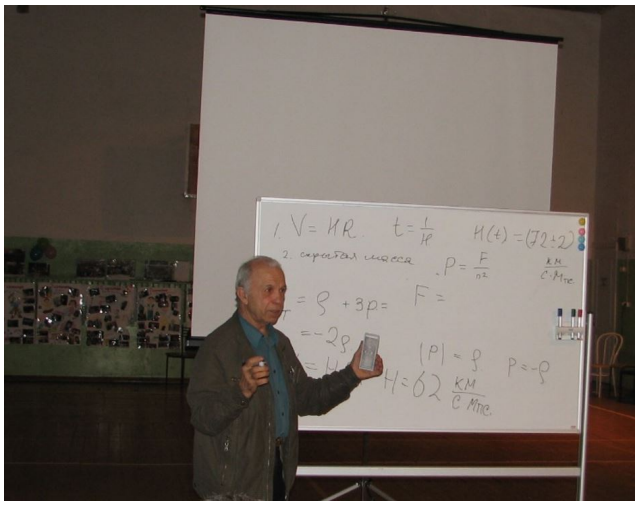


Рис. 2. М.И. Куркин, «Нильс Бор», доклад на СПФКС-12, 2011 г.

Мы подробно разбирали доклады участников, и Михаил Иванович Куркин объяснял аудитории то, чего не понимал сам докладчик. Дружелюбный настрой, атмосферу единения и любви к физике мы постарались воссоздать на всех следующих Школах». «У нас была школьная доска, и дальнейшие выступления шли у доски». Отсюда пошла одна из традиций СПФКС — иметь в зале заседаний доску. Правда, школьная меловая доска за это время превратилась в пластиковую маркерную. У Михаила Ивановича (пока доска не стала маркерной) всегда с собой был стратегический запас мела в специальном полиэтиленовом мешочке. Вообще, на любом своем выступлении Куркин использовал доску для того, чтобы более доходчиво изложить материал (см. рис.1, 2).

Рис. 3. СПФКС-1, 2001 г., Куркин, Гудин, Немченко, Неверов, Гудина.

«Лектора после своих докладов уехали, а М.И. Куркин остался, став в какой-то степени наставником последующих школ. Из первых десяти школ он был на восьми, а на следующих десяти сделал еще 5 приглашенных докладов. Ну а на СПФКС-1 кроме своей лекции, Михаил Иванович провел практическое занятие по постройке зимнего жилища эскимосов — иглу. Жилище было нами успешно построено» (см. рис.3-4). Для иглу надо было утрамбовать снег, а потом пилой, которую Куркин привез с собой, выпилить из него кирпичи. Вообще, строить иглу Михаил Иванович начал задолго до этого на знаменитой школе физиков-теоретиков "Коуровка"(фото на рис. 5). И тут получилось очень символично — вместе с наукой о постройке иглу Михаил Иванович как бы дал благословение СПФКС расти и развиваться.

Рис. 4. СПФКС-1, 2001 г., финишный этап постройки иглу.

Михаил Иванович любил физику, интересовался различными ее направлениями, тематика его приглашенных докладов на СПФКС очень разнообразна. Приведу названия его докладов, сделанных на Школе: 2001 г. **СПФКС-1** “Семь постулатов квантовой механики”, **СПФКС-2** «Ридберговское вещество — материал для шаровой молнии», **СПФКС-3** «Остановка света в веществе», **СПФКС-4** «Свойства пространства-времени и инфляционная гипотеза», **СПФКС-5** «Эйнштейн — изобретатель и экспериментатор», **СПФКС-6** «Фотонные кристаллы», **СПФКС-7** «Основные экспериментальные данные, определяющие различие в свойствах классических и квантовых эффектов», **СПФКС-8** «Магнитоэлектричество, которое не описывается уравнениями Максвелла», **СПФКС-11** «О фотонных кристаллах», **СПФКС-12** «Нильс Бор» , **СПФКС-16** «Бозе-эйнштейновская конденсация ядерных спиновых волн», **СПФКС-19** «Экспериментальные данные, определяющие особенности математического аппарата квантовой механики», **СПФКС-20** «Новая квантовая модель спиновых подрешеток». Многие из этих лекций сохранились в видеозаписях, хранящихся в архиве на сайте СПФКС. После того, как Михаил Иванович стал опекать СПФКС и ее участников, он стал частым гостем на посиделках молодежи в институте. Одним из традиционных пожеланий Куркина молодым был тост: «За то чтоб вы полюбили физику!» К сборнику тезисов докладов СПФКС-5 Михаил Иванович написал вступительную статью, в которой цитатами известных ученых дал напутствие молодому поколению. Эта статья приводится ниже. В заключении я хочу привести слова Юрия Павловича Ирхина: «Теоретическая физика — эта такая специфическая область человеческой деятельности, которая позволяет сохранять молодость до старости, оставаясь ребенком всю свою взрослую жизнь». Видимо, молодость души и позволяла Михаилу Ивановичу близко сходиться с молодыми учеными, быть постоянным участником СПФКС, «любимым лектором» и наставником, болеющим о молодых ребятах.

СПФКС-21 проходила в непростые времена, так что в 2020 году из-за осенней вспышки ковида пришлось перенести школу-семинар на март 2021 года. Дату проведения рассчитывали так, чтобы школа-семинар прошла во время минимума заболеваемости. Предсказание попало в яблочко! В начале этого года удачным опытом переноса и прогнозирования спадов заболевания мы поделились с организаторами школы физиков-теоретиков Коуровка-39, сроки проведения которой были сдвинуты на 2 месяца. В результате переносов на СПФКС-21 было разослано рекордное количество информационных сообщений - семь. Смелость и удачное время проведения привело к синергетическому эффекту — аномально большому количеству участников (зарегистрировалось 346 человек, принято к публикации тезисов — 293). Возникли проблемы с размещением участников, так как на такое количество проживающих (с поселением 2 человека в номере) база отдыха не была рассчитана. Но трудности были преодолены и Школа-семинар прошла на высоком научном и эмоциональном уровне. Казалось бы, ковид успешно преодолен и трудные времена должны закончиться, но в феврале 2022 г. началась СВО, а с 21 сентября началась частичная мобилизация. Если добавить к этому, что последние гранты РФФИ закончились, т.е. уменьшилось и финансирование ученых, то не мудрено предвидеть падение количества участников СПФКС-22. Число зарегистрирован-

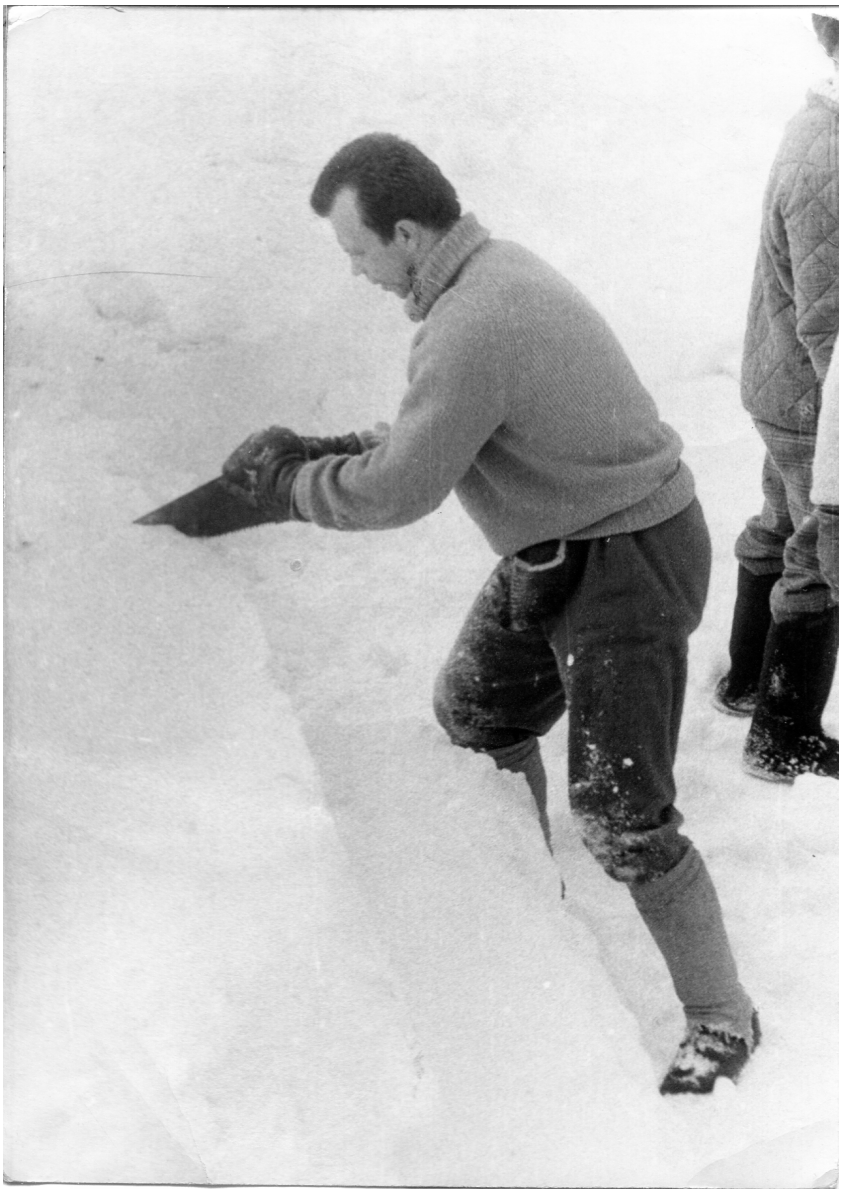


Рис. 5. М.И. Куркин. Постройка иглу на Коуровке.

ных участников на СПФКС-22 (на момент написания статьи) — 240, а число поданных тезисов докладов 212. Если по количеству зарегистрировавшихся по сравнению с предыдущими годами наблюдается существенный провал (см. график на рис.6), то если не учитывать аномальный 2021 год, число поданных докладов находится на уровне последних 6 школ. Приезжают на Школу-семинар участники с докладами, поэтому есть основание надеяться, что падение количества очных участников будет незначительным.

Если анализировать динамику изменения числа участников на СПФКС по категориям (см. график на рис.7), то можно заметить неизменный рост числа участников — докторов наук и членов РАН. Похожая положительная динамика наблюдается и среди участников- кандидатов наук. Если не учитывать аномальный 2021 год., то в течении последних 7 лет наблюдается отрицательная динамика числа участников-студентов.

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

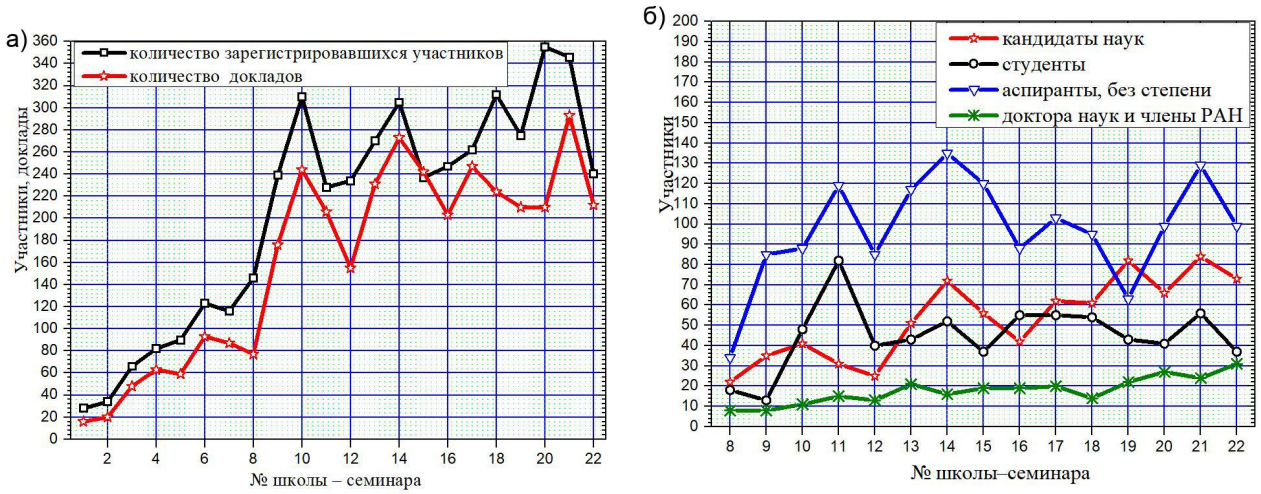


Рис. 6. (а) Динамика изменения числа участников и докладов на СПФКС. (б) Динамика изменения числа участников на СПФКС.

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 прочувствовать, что такое организация Всероссийской школы-семинара СПФКС, приходите, мы будем рады новым людям!» В этом году в команду оргкомитета СПФКС пришли 5 молодых ребят. Мы очень рады такому притоку свежей крови, надеемся, что им понравится, и они, приобщившись к Делу, станут полноправными членами оргкомитета!

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–22
к.ф.-м.н. С.А. Гудин

Вступительная статья к сборнику тезисов докладов СПФКС-5

Обожаемые участники и участницы семинара!

Свое вступительное слово к этому сборнику я хочу начать с благодарности за приглашение на ваш семинар, а за честь написать вступительное слово меня просто распирают «зазнайство и гордыня» (в кавычках слова Виталия Щербинина, сказанные, правда, не по моему адресу). Должен заметить, что написать такое слово по такому поводу — чертовски сложная задача. В нем нельзя давать советы (что такое советчик знает каждый, кто играл в карты или шахматы). Оно не должно состоять из пожеланий (все благие пожелания обычно никак не подтверждены возможностями). Один красивый грузинский тост заканчивается словами: «Так выпьем за то, чтобы наши желания совпадали с нашими возможностями». Наконец, я решил, что не буду пытаться вас чему-нибудь научить, так как вовремя вспомнил высказывание А.П. Чехова: «Умный любит учиться, а дурак - учить». В таком случае, чем для вас могут быть интересны старики, вроде меня? По-видимому, только воспоминаниями о том времени, когда они были молодыми. Насколько мне помнится, я оказался в обществе ученых, главным образом потому, что они были очень веселыми людьми при всей тоталитарности того режима. По этому поводу Александр Зиновьев выразился так:

> А что касается наград,
> То не сочти за злую шутку,
> Хотя бы на одну минутку
> Верни меня в тот прошлый ад.

В доказательство того, что настоящие ученые — это веселые люди, я приведу несколько популярных среди них афоризмов:
Серьезность — это такая глупость, только с высшим образованием (Патрик О'Рурк).
Студенту нельзя жениться. Будет заниматься женой — появятся хвосты. Будет заниматься учебой — появятся рога. Будет заниматься и тем и другим — отбросит копыта (К. Мелихан).
Рано или поздно любопытство становится грехом; вот почему дьявол всегда на стороне ученых (Анатоль Франс).
Научная работа — это когда читаешь две книги, которых раньше никто не читал, чтобы написать третью, которую никто не будет читать (N.N.).
Если вы крадете у одного автора — это плагиат; если у многих — это исследования (Уилсон Мизнер).
То, что понимают плохо, часто стараются объяснить с помощью слов, которые не понимают (Гюстаф Флобер).
«И т.д.» - сокращение, намекающее на то, что автор знает больше, чем на самом деле (Лепард Левинсон).
Произношение слов, смысл которых оратор не понимает, не следует считать рассуждением (Шарль Фурье).
Я знаю, что меня легко убедить в чем угодно, поэтому никакие доводы меня не убеждают (Альбер Моруа).
Эрудиция: пыль, вытряхнутая из книги в пустой череп (Амброз Бирс).
Никто не верит в гипотезу, за исключением того, кто ее выдвинул, но все верят в эксперимент, за исключением того, кто его проводил (N.N.).

Объяснить можно все, даже то, что не возможно понять (N.N.).
Ум за разум — брак ученого с практичной женщиной (А. Рас).
Если теория совпадает с экспериментом — это уже не открытие, а закрытие (П.Л. Капица).
Фундаментальные исследования — это то, чем я занимаюсь, когда я понятия не имею о том, чем я занимаюсь (Вернер фон Браун).
Любая формула, включенная в книгу, уменьшает число читателей вдвое (Стивен Хокинг).

Закончить этот список я хочу серьезными словами Альберта Эйнштейна: *«Единственное, чему научила меня моя долгая жизнь, что наша наука перед лицом реальности выглядит примитивно и по-детски наивно — и все же — это самое ценное, что у нас есть»*.

Эйнштейн считал науку самым ценным, возможно, потому, что все остальное у него уже было в достатке. Но с другой стороны, Моцарт вполне мог быть таким же вполне преуспевающим музыкантом как Сальери, но тогда бы он не был Моцартом. Для человечества в целом лучше, что он был Моцартом, хотя семья его, скорее всего, имела другое мнение и их можно понять. Продолжая свою эту мысль, закончу свое вступительное слово припевом из одной известной песни:

Оркестр гремит басами,
Трубач выдувает медь,
Думайте сами, решайте сами,
Иметь или не иметь.

М. И. Куркин

Уникальный человек

Оглядываясь назад и пытаясь понять, каким был ушедший от нас человек, мы вспоминаем о его поступках, делах, словах и устремлениях, сравниваем и анализируем воспоминания, делаем выводы, порой удивляющие нас. Вот такими размышлениями я бы и хотел поделиться.

Впервые я столкнулся с Михаилом Ивановичем Куркиным на защите диплома в УПИ в 1996 году. В комиссию по защитам входил приглашенный эксперт — заведующий лабораторией теоретической физики Института физики металлов УрО РАН Куркин Михаил Иванович. Он много лет подряд работал в этой комиссии, и то, что он не был простым статистом, подчеркивает тот факт, что об этом до сих пор с теплотой вспоминают выпускники теоретической кафедры УПИ–УГТУ разных годов. Следующая встреча произошла практически сразу же, когда я искал себе руководителя для поступления в аспирантуру. Михаил Иванович Куркин, выслушав мою просьбу, извинился и отказал, сказав, что в аспирантуру он принципиально никого не берет. Вообще, после этого случая в течение нашего с ним длительного общения Михаил Иванович еще два раза извинялся передо мной. Его отказ был связан не с конкретной личностью, а с его убеждениями, но об этом будет рассказано чуть позже. Следующим в списке потенциальных научных руководителей шел Владимир Иосифович Гребенников. Получив его согласие, я стал аспирантом и младшим научным сотрудником лаборатории теоретической физики. Моим учителем Михаил Иванович стал позже, когда у нас появились совместные работы. Он учил меня любить и понимать физику, чувствовать ее красоту, раскрывать ее тайны.

Михаил Иванович, с одной стороны, был очень добрым, заботливым, порядочным и покладистым человеком, но, с другой стороны, у него были определенные убеждения, с которых его было не свернуть. Если он что-нибудь решил для себя, то потом его уже было не переубедить, он стоял на своем, зачастую обосновывая свою позицию совершенно абсурдным образом. После тесного общения с Михаилом Ивановичем в течение более 20 лет начинаешь понимать истинные составляющие многих таких его убеждений, которые он всячески скрывал от других. Свое твердое убеждение — не брать никого в аспирантуру, Михаил Иванович обосновывал тем, что он не хочет обрекать молодого человека на нищенское существование. Я уверен, что на самом деле это связано с его уникальным строением ума. Михаил Иванович мыслил не так, как мыслили остальные физики, и он понимал, что не может обучить такому способу мышления других (поэтому никого и не брал к себе в аспирантуру).

Уникальность его мышления заключалась в том, что оно было «аналоговым», а не «цифровым», как у остальных ученых. Я попытаюсь расшифровать, что под этими терминами понимаю. Физические взаимодействия наука описывает при помощи формул, и ученые обычно и понимают физическую картину того или иного явления, основываясь на полученных формулах. То есть физическое явление описывается системой математических уравнений, в результате решения этих уравнений получается математический результат, который интерпретируется на физическом языке. Такое мышление я условно назвал «цифровым», в нем действует следующая логическая цепочка: рассматривается физическая задача, задача записывается с помощью математических уравнений, затем следует решение этих уравнений, далее - физическая интерпретация полученных математических решений. Так мыслит большинство физиков. Михаил Иванович мыслил по-другому. Он в голове представлял весь физический механизм процесса с учетом силы и величины взаимодействий, мысленно моделировал, как какой процесс влияет на другой процесс, к чему это приводит, и какой получается результат. Смоделировав в уме задачу и получив ответ, он эту модель «облачал» в фор-

мулы, и, решив их, «обосновывал» давно полученный им ответ. Такое мышление я условно назвал «аналоговым». У Михаила Ивановича, действовала следующая логическая цепочка: рассматривалась физическая задача, все происходящие в ней процессы моделировались в голове, в результате мысленного эксперимента получался какой-то результат, если результат получался физичным, то все мысленно замоделированные процессы описывались математическими формулами, решение которых приводило к результату, который Михаил Иванович давно получил в уме. Как это у него получалось, я мог понять только, имея формулы, понимая, как они решаются, и к чему это приводит. То есть мне удавалось, прокручивая в обратном порядке задачу, понять, как Михаил Иванович получил решение, но мыслить, как он было очень трудно. Зато после такой «прокрутки» создавалось ощущение, что ты понимаешь, что и как происходит в рассматриваемой системе на сто процентов.

Различие между «аналоговым» и «цифровым» мышлением поясню на примере. Известно, что «задача трёх тел» в астрономии, состоящая в определении относительного движения трёх тел, взаимодействующих по закону тяготения Ньютона, в общем случае не имеет решения в виде конечных аналитических выражений. Но еще в древней Греции создавали механические системы, моделирующие движение по орбитам всех планет солнечной системы. Так и Михаил Иванович, моделируя в голове задачу, получал решения с учетом той или иной особенности рассматриваемых взаимодействий. Из примера становится понятным, что «аналоговые» системы могут выдавать решения для систем много большей сложности, чем могут точно посчитать «цифровые».

После защиты кандидатской диссертации у нас с Михаилом Ивановичем началось тесное и плодотворное научное сотрудничество. Обычно новая физическая задача решалась таким образом. В первой статье описывалась сама проблема, рассматривались взаимодействия, которые существенны, оценивались величины и скорости физических процессов. Тут Михаилу Ивановичу не было равных, так как в его голове задача уже была смоделирована. Эта первая работа практически не содержала формул, но потом на ней основывался весь комплекс последующих работ. На самом деле эта, казалось бы, простая, бесформульная и понятная работа была очень важна. Так, когда мы занимались описанием свойств магнитных мультислоев, в которых наблюдается гигантское магнитосопротивление, мы пересеклись с конкурирующей научной группой. Эта группа развивала сходные методы описания этих систем, но на этом первом этапе исследований неправильно учла величины взаимодействий и, двигаясь в этой парадигме, получала результаты несоответствующие действительности, т.е. их решения были математически верными, но они исходили из неверных предпосылок и получалось, что не собака вертит хвостом, а хвост управляет собакой.

В последующих наших статьях мы решали сформулированную в первой статье задачу. В начале мне было абсолютно не понятно, откуда Михаил Иванович заранее знает ответ для еще нерешенной задачи, потом же я понял это уникальное свойство его ума. Мне известен только один случай, когда это «аналоговое» мышление его подвело. Для трехслойных систем железо/хром/железо мы рассчитывали фазовую диаграмму магнитных состояний в зависимости от величины обменных взаимодействий, шероховатостей границ раздела и толщины слоев, с учетом того, что в прослойке хрома существовали несоизмеримые волны спиновой и зарядовой плотности. Задача была достаточно сложная, и мозг Михаила Ивановича не смог смоделировать и решить эту задачу целиком, математически же мы ее решили, рассматривая отдельные кусочки этой магнитной фазовой диаграммы. Но есть и другой контрпример. В следующей нашей работе мы рассматривали влияние магнитного поля на систему железо/хром/железо для различных участков вышеупомянутой фазовой диаграммы. Михаил Иванович, проведя свой мысленный эксперимент, понял, что возможен нетривиальный

случай — выход кривой намагничивания за пределы петли гистерезиса. После нескольких месяцев расчетов мы подтвердили этот результат.

Коллеги по-разному воспринимали Михаила Ивановича. Одну полярность можно охарактеризовать, процитировав слова, как я считаю, выдающегося экспериментатора и соавтора Куркина — Королева Александра Васильевича, сказанные мне в личной беседе: «А тебе чего переживать? Ты же с Михаилом Ивановичем, а он — гений». Но была, хоть и немногочисленная, и другая полярность. В нее входили люди (в основном относящие себя к теоретикам, я бы сказал так, с ортодоксальным «цифровым» мышлением), которые воспринимали деятельность Михаила Ивановича в штыки. Думаю, это связано с тем, что они не понимали уникальности мышления Куркина и не воспринимали его попыток «на пальцах» объяснить тот или иной сложный эффект. Помню, как на ученом совете ИФМ зашел спор про какое-то сложное физическое явление, и докладчик не смог его объяснить. Тогда встал Михаил Иванович и начал объяснять. Один из «невоспринимающих» Куркина выкрикнул: «Да ну его слушать». На что директор института Устинов Владимир Васильевич сказал: «Пусть говорит. Он хорошо объясняет».

Еще одна жизненная установка Куркина — это его отношение к начальству. Он считал: «Если начальство говорит делать, то это надо не обсуждать, а выполнять». Михаил Иванович был учеником выдающегося ученого Евгения Акимовича Турова. Через всю свою жизнь он пронес чувство уважения к этому человеку. Увидев научный потенциал и уникальный ум Михаила Ивановича, Туров отправляет его в командировки по стране, докладывать докторскую диссертацию. Когда тот успешно выполнил это задание, защита докторской стала технической задачей. Вот как Туров характеризует своего ученика в 1972 году: *«М.И. Куркин является одним из наиболее активных и инициативных сотрудников Отдела теоретической физики ИФМ УНЦ Академии наук СССР… Работам Куркина присуща не только теоретическая глубина и оригинальность, но и стремление донести их до экспериментаторов… М.И. Куркин не только сам ведет плодотворную научную работу, но и учит этому других»*.

Когда по возрасту Евгений Акимович оставил пост заведующего теоретической лабораторией, то своим преемником и продолжателем дела он видел только Куркина. Уверен, что сам Михаил Иванович из-за своей скромности и нежелания орудовать локтями, никогда бы заведующим не стал. Но указание начальника (а Турова Куркин считал своим начальником до последних дней жизни) он ослушаться не мог. Были еще случаи, когда Михаил Иванович беспрекословно выполнял волю начальства, которая далеко не всегда была для него благоприятна.

Следующая задача, которую мы решали совместно, была связана с описанием эффекта колоссального магнитосопротивления, наблюдающегося в допированных манганитах. Мы подключились к этой задаче, когда бум по теме колоссального магнитосопротивления уже стал спадать. За это время были написаны тысячи статей, но адекватного количественного описания эффекта в широком температурном интервале никто не сделал. Работа нами велась успешно и опиралась на догадку Михаила Ивановича, что даже в монокристаллических манганитах, из-за допирования атомами другой валентности, возникают зарядовые и магнитные неоднородности, приводящее к тому, что для описания проводимости необходимо учитывать несколько механизмов рассеяния. Но в один момент Михаил Иванович от этой деятельности отошел. Я не понимал, что произошло, и думал, что даже Куркин в силу возраста стал неспособен воспринимать что-то новое. Мое предложение описывать рассматриваемые нами магнитные неоднородности на языке спиновых поляронов не противоречило нашим предыдущим исследованиям, но опиралось на модель уже разработанную Климентом Ильичом Кугелем и Даниилом Ильичом Хомским. Михаил Иванович не критиковал и

не отрицал, а просто отошел, наблюдая за моей деятельностью со стороны. Как я понимаю, Михаил Иванович предоставил мне возможность развиваться самостоятельно.

Остановлюсь на отношении Куркина к экспериментаторам. Это еще одно его убеждение. Он считал, что экспериментаторы первичны и более важны, чем теоретики, которые должны описывать и объяснять эксперимент. Михаил Иванович как заведующий лабораторией никогда не выдвигал меня на молодежные премии и гранты. В последствии он попросил у меня прощения за это, объясняя свой поступок тем, что, по его мнению, экспериментаторам это нужнее, так как для науки они более важны.

Отношение к хлебу. В возрасте 4 лет в 1942 году Михаил Иванович после смерти от туберкулеза матери попал в детский дом. До последних дней жизни в столовой он не мог видеть, как кто-то рядом оставляет недоеденный хлеб. Куркин забирал и съедал этот кусочек хлеба. Трудное детство сформировало его мировоззрение, он считал, что все должно быть, по справедливости. В самом начале двухтысячных один из сотрудников лаборатории сказал: «Куркин строит в лаборатории социализм».

Все же Михаил Иванович поменял свое отношение к научному руководству аспирантами. В 2003 году Куркина позвал к себе Юрий Александрович Изюмов и попросил его стать председателем оргкомитета знаменитой школы физиков-теоретиков «Коуровка». Михаил Иванович, следуя своим принципам, не смог отказать академику РАН. Придя к себе, он осознал всю трудность задачи и, ужаснувшись, загрустил. Как он признался после проведения «Коуровки»: «Я уже начал плести веревочку и приглядывать сук». К тому времени Михаил Иванович уже трижды съездил на СПФКС (школу-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества), где не просто читал лекции, а прививал молодому поколению любовь к физике и делил с ними все тяготы довольно спартанских условий проживания. Вот как описывает знакомство с Михаилом Ивановичем Камал Хизриев, руководитель Института физики им. Х.И.Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, вспоминая свой первый приезд в 2006 году на СПФКС, когда он был еще молодым ученым (описываемые события происходили на базе отдыха, в довольно спартанских условиях, когда на улице стояли тридцатиградусные морозы): «… кто-то около теплых батарей отопления обсуждал только что прослушанные доклады. У этих батарей я впервые познакомился с легендарным и уникальным лектором Михаилом Ивановичем Куркиным, который после своей лекции «Основные экспериментальные данные, определяющие различие в свойствах классических и квантовых эффектов» остался на все время семинара на базе отдыха и делил с нами не только зал заседания, но и место в столовой во время приема пищи, и, конечно, был активным участником регулярных культмассовых мероприятий». Весь основной состав оргкомитета СПФКС откликнулся на мой призыв помочь Куркину организовать «Коуровку». Задача была решена, и после «спасения жизни» Михаил Иванович не мог отказать моей просьбе взять себе в аспирантуру Наталью Бакулину.

В заключение я бы хотел привести рассказ самого Михаила Ивановича, который я слышал 28.01.2014 в библиотеке ИФМ УрО РАН на вечере воспоминаний «Туров Евгений Акимович - 90 лет со дня рождения»: *«На школе физиков теоретиков "Коуровка"лет 30 назад собрались Туров, Куркин и Думеш покататься на лыжах. Ботинки лыжные на базе проката были рваные. Туров: "Что делать?"Куркин: "Давайте я зашью. У меня шило специальное есть". Берет ботинок и начинает зашивать. Следующие ботинки Бориса Думеша. Тот заинтересовался, просит: "Дай попробовать". Куркин: "На, только смотри, не сломай. Знаешь, чем модуль Юнга от модуля сдвига отличается? Так вот, тянуть надо осторожно, чтоб сила прикладывалась вдоль оси шила. Сломаешь - в одном ботинке побежишь!"Через какое-то время приезжает Куркин в Москву, там его спрашивают: "Что вы там с Думешем сделали?*

На Коуровке. Сидят на снегу М.И. Куркин и С.В. Вонсовский

Он теперь шитьем занимается и при этом бормочет как заклинание: ”Модуль Юнга, модуль сдвига, модуль Юнга, модуль сдвига...”».

С.А. Гудин

Мои воспоминания о Михаиле Ивановиче

В 2002 году я пришла работать в Лабораторию теоретической физики, которую возглавлял Михаил Иванович. Помню сильное волнение, почти страх перед незнакомым коллективом и новыми обязанностями, ведь мое новое место работы - это серьезный исследовательский институт. Воображение рисовало мне великих ученых — строгих, очень требовательных, гениальных, честных, не терпящих невежества... Забавно сейчас вспоминать свои детские представления о научном сообществе, но тогда было страшно не оправдать оказанного доверия помогать великим людям двигать науку вперед.

В первый рабочий день Михаил Иванович скромно постучал и спросил разрешения войти, он очень смущался: «Наташенька, я совсем не дружу с компьютером, если у тебя будет время, смогла бы ты мне помочь с оформлением статьи?» Вот это да, начальник спрашивает, есть ли у меня время на мою работу!

По-своему гениально! Поняв, в каком напряжении я нахожусь в этой новой обстановке, он постарался сделать все, чтобы меня успокоить.

Вот так, день за днем, работу мы делали, а потом меня благодарили каждый раз, как будто я сделала огромное одолжение, поили чаем, угощали шоколадом и пирожками из ифмовской столовой, развлекали разговорами, включали классическую музыку на старом кассетном магнитофоне. М.И. был мудрым собеседником, уважал чужое право не понимать что-то, расти самостоятельно, не пытался навязывать свое видение, не был категоричен, а проявлял понимание и терпение, оказывал поддержку.

М.И. был очень нетипичным руководителем, повезло, что он стал близким человеком, который обо мне заботился. Он помнил о моем дне рождения, спрашивал, какой я хочу подарок, занимался математикой и физикой с моим сыном, приходил к нам домой, чтобы установить сантехнику, весной приносил первую черешню, летом овощи из своего сада, а зимой картошку. Он был мастером на все руки, в сложные годы чинил обувь и мебель в кабинете. Ящичек с инструментом он брал с собой даже в поездки, так однажды на базе он отремонтировал замок в номере коллег. К нему не боялись обращаться, все знали, что если нужен молоток, отвертка или даже стремянка, то их можно найти в кабинете у М.И.

Кабинет Михаила Ивановича был особым местом, он с удовольствием предоставлял его для празднований или собраний. Участвовал во всех посиделках, и это были теплые и дружеские посиделки. Мы любили слушать М.И., его истории из жизни о людях, с которыми ему довелось трудиться, и которых мы, молодежь, уже не застали, но могли составить свое впечатление о них по рассказам. Сейчас жалею, что не делала тогда заметок.

Слушать М.И. всегда было очень интересно, что неудивительно, этот человек всю жизнь учился, развивался, обогащался в культурном смысле и стремился поделиться приобретенным культурным багажом с близкими.

М.И. очень любил свою работу. В науке он всегда старался быть в курсе последних достижений. М.И. обладал удивительной дисциплинированностью, собранностью и трудолюбием. Он трудился до последнего дня, даже когда болел, просил приносить работу на дом. Коллеги ценили в нем физическую интуицию и критическое восприятие заумных теорий и сложных построений.

М.И. был очень отзывчивым человеком, но всегда вовремя мог сказать «нет» людям, которые начинали злоупотреблять его добрым отношением. Несмотря на кажущуюся простоту, М.И. умел выстраивать границы, быть требовательным, когда надо, ценить себя, свою работу и время.

Находясь на руководящей должности, он смог сохранить свои положительные качества. Он никогда «не работал локтями», не интриговал, не завидовал и относился с уважением к чужому успеху, но также имел смелость высказаться, если считал методы, которыми человек пришел к этому успеху, нечестными.

Я поняла и приняла стиль Михаила Ивановича, перестала испытывать неловкость, когда хвалят даже по пустякам, разобралась в обстановке и даже рассказала ему о своих изначально наивных представлениях, как мне казалось, об «особых» людях, М.И. тогда улыбнулся и сказал: «Люди везде одинаковы. Не зависят человеческие качества от статуса».

С годами отношение М.И. ко мне не менялось, он тихонько стучал в дверь и любую просьбу начинал с фразы: «Наташенька, если у тебя найдется для меня время...».

С возрастом понимаешь, что самые простые вещи в этой жизни оказываются правильными и надежными. Доброта, забота, любовь и терпение — Михаил Иванович предпочитал завоевывать людей именно этими качествами, поэтому я доверяла ему, чувствовала себя рядом в безопасности и очень благодарна за такое отношение.

Гапонцева Наташа

О Куркине Михаиле Ивановиче от его аспирантки Орловой (Бакулиной) Натальи Борисовны

Своего будущего научного руководителя, Михаила Ивановича Куркина, впервые я встретила на III Молодёжной школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества. Михаил Иванович любил СПФКС и с удовольствием участвовал в школе, собирал значки с каждой поездки, и всегда надевал их на следующее мероприятие. Я считаю, что именно молодёжная школа-семинар является очень удачной площадкой для разговоров о профессоре Куркине. Третья «ИФМовская молодёжка», тогда ещё сокращения СПФКС не существовало, была в 2002 году. Девятнадцать лет назад были другие технические возможности, была доска и кодоскоп, и «прозрачки», сейчас ноутбук и проектор, но что не поменялось за это время, так это общая стилистика лекций. Лекции Михаила Ивановича были другие, ему всегда было важно, чтобы его понимал слушатель, стремился показать красоту физического явления и его теоретического описания простыми схемами, которые он рисовал мелом на доске. Даже когда пришла эпоха презентаций стилистика лекций не поменялась.

В 2003 году Куркин читал у нас, магнитчиков, курс «Теория магнетизма». После каждой темы Михаил Иванович просил задать ему вопрос, даже на экзамен просил подготовить ему вопросы. Мне, как отличнице, было очень тяжело, сдать по билетам представлялось намного более простой задачей. Я «осилила» сформулировать три вопроса, причём крайне слабых... Завалил он меня, как я сейчас понимаю, но по доброте своей в ведомость поставил пятёрку.

В 2005 году я, с подачи Сергея Гудина, поступила в аспирантуру к Михаилу Ивановичу. Я не устаю поражаться, как Михаил Иванович смог пронести через года и смены эпох те черты характера, за которые я его и выбрала как научного руководителя. Целостная картина мира, мягкое и упорное отстаивание своих убеждений и доброта, которая крайне редко кому свойственна.

Ученый изучает новое всю жизнь, он — вечный студент, решающий новые задачи. Только, в отличие от студента, ученый сам находит себе задачи. У Михаила Ивановича до последних дней были такие задачи, не все он успел решить.

Орлова Н.Б.,
канд. физ-мат. наук, доцент

Куркин Михаил Иванович. Воспоминания сына

Я с некоторой робостью и большим трепетом пишу эти строки о своем отце, Куркине Михаиле Ивановиче. Ведь для тех, кто будет читать эти строки он — ученый, друг, сослуживец, а для меня нежно любимый папа и лучший друг. Именно друг, потому что я не могу вспомнить, чтобы он когда-нибудь меня наказывал или ругал. Папа воспитывал своим примером и только иногда позволял себе давать советы.

Я помню наш старый дом на ул. Мамина-Сибиряка, 137. В нем жили в основном работники Уральского отделения Академии наук. Вечером папа приходил с работы, и мы шли гулять или в наш чудесный огромный, как мне тогда казалось, двор, или в парк Дворца пионеров. Мы играли всегда весело и увлеченно. Папа удивительным образом умел становиться товарищем моих детских игр. Мы могли и просто разговаривать. Я сочинял какие-нибудь истории или делился своими маленькими детскими секретами. Папа всегда внимательно выслушивал меня, на полном серьезе обсуждал со мной мои проблемы, вместе со мной искал и находил выходы из сложных для меня ситуаций. У него вообще был талант: слушать людей.

Отец и сын

В нашем доме все друг друга знали, несмотря на то, что дом был новый. Как водится, при переездах люди обустраивают свои жилища, меняют замки, словом, что-то обязательно улучшают. И очень скоро папа стал известен в доме как человек, способный качественно и быстро заменить замок, либо изготовить любой ключ. У него всегда при себе был целый набор напильников и ящик старых ключей, которые он собирал везде. У нас до сих пор хранится этот ящик. Папа вообще любил собирать старые вещи и по-детски радовался, когда удавалось дать им новую жизнь. Это не было каким-то скопидомством. Он считал, что с нашей привычкой все выбрасывать на Земле скоро не останется ресурсов, и она «утонет» под слоями мусора. В папиных руках второе рождение получали старые сапоги, ботинки, тапочки, волейбольные мячи для институтской секции… «Надо же, теоретик, а умеет работать руками!» — восхищенно сказал однажды о папе кто-то из корифеев Института физики металлов, возможно это был М.Н. Михеев. Папа посчитал эти слова самой лестной характеристикой в свой адрес.

Отдельной семейной историей были ежегодные папины сборы на Коуровские мероприятия. Это было целым ритуалом. В первую очередь готовились к поездке лыжи и лыжная мазь, ведь заядлый лыжник не может ехать за город без своих верных «друзей». Просто необходимо взять с собой набор инструментов - всегда найдется применение молотку и набору отверток, ведь, как пить дать, обязательно потребуется что-нибудь починить! Свое законное место в дорожном рюкзаке занимали шило с крючком, дратва, набор иголок, папа знал по опыту, что обязательно придется кому-нибудь что-нибудь зашить. На сто процентов понадобятся ножовка и лопата, ведь без них совершенно невозможно построить снежную избу — иглу! Ее возведение было одной из коуровских традиций. Она строилась в полный рост и вмещала в себя не менее десяти человек. Папа был единственным в компании, кто умел это делать, и до сих пор многие вспоминают посиделки в этом снежном «доме». Во время наших с ним зимних походов я и сам не раз наблюдал, как мастерски он это делал. Это вызывало восхищение.

А еще папа умел сочетать горячо любимую науку с практической работой по дому или на даче. Он объяснял мне, как нужно сложить печь в саду, каким должно быть расстояние между рамами окна для наименьшей теплопроводности… Помню мы решили строить балкон на даче. «Чтобы балкон не гнил, вода должна стекать с него. Значит, пол должен быть с наклоном. Угол наклона определим опытным путем. Берем доску и карандаш, наклоняем доску, пока карандаш не начнет с нее скатываться». Угол наклона получился примерно пять градусов.

Еще одним его талантом было умение выбирать спелый арбуз. Сначала папа выбирал арбузы по звуку, щелкая по ним, потом и под это подвел научную базу — определил примерную плотность спелого арбуза и вывел короткую формулу для определения этой плотности. Формула эта потерялась, а сейчас уже и не у кого о ней спросить.

Папа очень ценил смекалку, умение нестандартно мыслить и вообще умение думать, часто цитировал слова П.Л. Капицы о его студентах: «Это не беда, что человек чего-то не знает. Мы этому его научим. Хуже, если человек не умеет думать. Этому научить почти невозможно». Сам же папа умел и думать, и учиться, и дружить, и быть преданным учеником. Своим учителем он считал Е.А. Турова. Их связывала многолетняя дружба. Когда Евгений Акимович заболел и не мог уже ходить в институт, отец навещал его и записывал под диктовку последние научные работы своего друга и наставника.

Папа умел профессионально столярничать. Дома он сделал стеллаж для книг и шкаф для одежды. Никто не верит, что шкаф самодельный. Когда папа работал, он всегда что-нибудь напевал, иногда Окуджаву:

Неистов и упрям,
Гори, огонь, гори...

«Капли Датского короля» было одним из его любимых стихотворений.

В 70-е годы в ИФМ устраивались «капустники». Папа приходил с этих капустников и начинал с ходу показывать их в лицах. Я там никогда не был, но папа так рассказывал об этом, что создавалась полная иллюзия присутствия на этих спектаклях.

Стихи Трахтенберга он очень любил и часто цитировал: «Но если нету ложечек — тогда не надо чаю, а раз не надо чаю, то ложечки зачем?»

Другим любимым поэтом был В. Щербинин. Его книги всегда лежали у папы на столе, в портфеле и кармане пиджака.

Большое место в папиной жизни занимала музыка. Предпочтение отдавалось классике. Он слушал ее и в филармонии, и в консерватории, и дома его нередко можно было застать сидящим в кресле и мастерящим что-нибудь обязательно под музыку И.С. Баха. В эти минуты я старался ему не мешать. Наверное, он думал в эти моменты о чем-то важном, а, может быть, просто отдыхал. В любом случае, отвлекать его совсем не хотелось.

В заключении мне хочется рассказать еще об одной беседе с папой. Наверное, за год до его неожиданного ухода, он рассказывал мне о детских чертах взрослого человека. Дети не отвечают за свои поступки, и это нормально, они еще научатся. А вот у некоторых взрослых та же черта. Это инфантильность, и это очень плохо. Но есть детская черта, которую стоит в себе сохранять на всю жизнь: дети познают мир и удивляются всему новому». Эту черту большого ребенка мой папа сохранил до последних дней. Он очень любил удивляться сам и удивлять других.

И еще. Папа был счастливым человеком, потому что всю жизнь занимался любимым делом. «Ты плохо ходишь, может, тебе пора выйти на пенсию?» — однажды спросила его мама. Папа грустно ответил: «А зачем тогда жить?»

Любящий и благодарный сын
Сергей Куркин

Когда правильно отмечать день Великой Октябрьской Социалистической революции [1]

Куркин М.И.

(*Пьеса в 4-х действиях с Прологом и Приложениями*)

Пролог

В науке нет прямой дороге,

Кривые все — о чем тут речь.

Моя сознательная жизнь в ИФМ началась с комнаты 313 (ныне 331) главного здания Института. До того все происходило на уровне инстинктов и не поддается смысловому анализу. Хотя к этому времени я успел побывать в «Коуровке-1», где прослушал лекции В.Л. Бонч-Бруевича про метод опережающих и запаздывающих функциях Грина. Я даже мог без запинки вслед за своими наставниками перечислить все достоинства нового метода. Главным из них было использование удачного нормированного множителя $\sqrt{2\pi}$, в то время как в прежних архаичных методиках все нормировалось на 2π или, что того хуже, не нормировалось вовсе (как это обычно я делаю сейчас).

Действие первое

Мы говорили диалектом (курсив мой — М.К.).

Я своих мыслей не скрывал.

(*Из воспоминаний о Леонардо да Винчи*)

Действующие лица: Я, Найш, и все сотрудники теоротдела, Плишкин входящий, Е.А. Туров был занят более важными делами.

К комнате 313 кроме меня были приписаны Валентин Найш и Евгений Акимович Туров, но Туров в то время был секретарем парторганизации Института, поэтому сидел за своим столом редко, а в его отсутствие в к. 313 толкался весь остальной теоротдел. Найшу это надоело, и он вывесил снаружи на двери объяву: «Без нужды не входить!»

Не успел он заправиться чернилами (шариковых ручек тогда еще не было), как ввалился Юра Плишкин со словами:

– Я по нужде!

Я предложил ему пометить по-собачьи ножку стола Турова, пока тот в отлучке. Плишкин очень серьезно на меня посмотрел, потом подошел и протянул руку:

– Миша, держи пять, — сказал он. — Я думал, что ты обычный отличник, а оказывается ты можешь и сам соображать. Мысль, конечно, не от Сократа и цитировать ее не будут, но он безусловно твоя, потому как на лекциях вам такого не рассказывали и на экзаменах не спрашивали.

Таким серьезным я Плишкина никогда не видел.

Действие второе

Отреагировал он быстро,

Он был в таких вещах удал.

(*Из воспоминаний об Исааке Ньютоне*)

[1] Отрывок из книги «Резонанс», Сборник литературных произведений сотрудников Института физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, 2001. С. 374.

Действующие лица: Я, Найш и Плишкин. Е.А. Туров опять в отлучке.

Сижу я как-то в к. 313 и в голову мне лезут разные собственные мысли.

«Это что же такое получается?», — думаю я про себя. «За Новый год мы пьем вначале по новому стилю, а по старому стилю тоже пьем, но спустя две недели. Но тогда почему мы Октябрьскую революцию мы отмечаем 7 ноября по новому стилю, а по старому стилю 25 октября, т.е. на две недели раньше». Продолжаю думать и понимаю, что сама по себе задачка так себе, но вместе с октябрьской революцией — это уже нечто, о чем можно рассказать даже самому Плишкину.

В реакции Плишкин не уступал Ньютону.

– И ты, стервец эдакий, до сих пор держал это в себе! — заорал он на меня, — сгреб в охапку и потащил с собой сеять разумное, доброе, вечное.

Действие третье

Меня тогда предупреждали,

Что он крутой был человек.

(*Из воспоминаний о Михаиле Ломоносове*)

Действующие лица: Я, Плишкин и зам. директора Института В.А. Трапезников.

Первым нам навстречу попался Виктор Александрович Трапезников и Плишкин все как есть изложил ему открытым текстом и про Новый год, и про Октябрьскую революцию. Трапезников, видимо, был не в духе, потому как ответил *сугубо грубо*.

– Что вы меня тут путаете? — обиделся он.

– Октябрьская революция произошла 25 октября по-старому стилю и 7 ноября по-новому. Это правильно.

– А как же новый год? — не уступал Плишкин.

– Значит, Новый год неправильный, — отрезал Трапезников.

По крутости Трапезников и Плишкин не уступали Ломоносову (см. Приложения 1 и 2), поэтому я сразу же вспомнил афоризм Плишкина:

«Желая досмотреть драку до конца, был избит обеими сторонами».

Чтобы выкрутиться как-то я предложил отмечать Старый Новый год дважды: один раз за две недели до 31 декабря, дабы не вступать в конфликт с Октябрьской революцией, а второй — как обычно, 13 января, чтобы не нарушать традиций.

Тогда мне казалось, что я очень ловко все придумал. Однако позже до меня дошло, что Плишкин и Трапезников, сходу и не сговариваясь, меня разыграли.

Действие четвертое

Из всех известных корифеев,

Которых знал я имярек.

Пожалуй, только Моисеев (курсив мой — М.К.)

Был очень скромный человек.

(*Из воспоминаний о Менделееве*).

Действующие лица: Я, Плишкин и А.И. Моисеев.

Затем нам навстречу попался Анатолий Иванович Моисеев, о невозмутимости которого в Институте ходили легенды (см. Приложение 3).

Моисеев выслушал Плишкина, как всегда, очень внимательно и не перебивая. Сколько я его помню, он всегда был членом партбюро Института, поэтому выслушивать претензии

трудящихся входило в его обязанности. Он согласился с Плишкиным, что проблема налицо (или на лице, что ни так важно), важнее, что классики марксизма-ленинизма не оставили никаких разъяснений на этот счет.

– Единственный выход, — заключил он, — вернуть царя, затем снова совершить Октябрьскую революцию и отмечать ее уже правильно.

Тогда мы приняли это предложение как очень удачную шутку. Ведь до перестройки и 1991 года было еще так далеко.

Занавес.

Приложение 1.

Юрий Михайлович Плишкин, в последствии зав. лабораторией вычислительных методов, по единодушному мнению женщин Института самый красивый, самый сильный и самый умный мужчина в Институте. Что касается красоты, то здесь я ничего не могу сказать, потому как не женщина. О его силе я могу судить по следующему случаю. В те времена любили меряться силой, поставив локти на стол и сплетя руки в кистях. Победителем считался тот, кто прижимал кисть побежденного к столу ладонью вверх. Сейчас это называется «армрестлинг». Так вот, левую руку Плишкина (он считал ее слабой) я не мог уложить двумя руками и упираясь во что-нибудь ногами.

Ну, а об уме мужчины лучше всего судить по тостам, которые он произносит. Вот один из тостов Плишкина на 50-ти летнем юбилее отдела теоретической физики в 1982 году. К тому времени в Институте уже было три теоретических подразделения (Турова, Изюмова и Плишкина). Плишкин обосновал необходимость трех таких подразделений тем, что меньшим количеством невозможно дружить. «Когда двое дружат, обязательно нужен третий, который бы их разнимал». По этому поводу мы дружно выпили за дружбу.

Приложение 2.

Виктор Александрович Трапезников стал заместителем директора в тот же год, когда я поступил в Институт, и был им пока не уехал в Ижевск, где стал директором Физико-технического института (вначале ижевского отдела ИФМ). Однажды он застукал нас за игрой в пинг-понг в рабочее время в недостроенной части Института. Туда мы попадали с помощью устройства, которому Плишкин дал кодовое название «Гвоздь». Можно было сказать: «Дай мне гвоздь» в присутствии начальства, и не вызвать у него никаких подозрений. Этот предмет, позволявший вскрывать замки, я действительно сделал из гвоздя. Экспериментаторы Института смотрели на него как на подкованную блоху, по их мнению, он ничего открывать не должен, но тем не менее открывал.

Когда Трапезников там объявился, я, как автор Гвоздя, очень занервничал и не могу сейчас точно вспомнить его слов, но смысл их оказался такой: «Ребята, можно с вами поиграть?» А когда мы расходились, он спросил: «Ребята, вы только никому. Вам-то что, а я все-таки зам. директора». Силы Виктору Александровичу, как и Плишкину, было не занимать. Рассказывали, как он однажды поехал на рентгеновскую конференцию в Ростов. Подъезжая к этому славному городу, он вовремя не сосредоточился и у него сперли брюки. И вот, в пиджачной паре выше пояса и в исподнем ниже он желает сесть в такси, чтоб быстрее добраться до оргкомитета конференции. Водитель истолковал его намерение несколько иначе и успел закрыться на защелку. Виктор Александрович немного не рассчитал усилия, поэтому ручка от двери, а может, и вся дверка оказались отдельно от машины. Меня там не было, так что врать не буду.

Приложение 3.

Об Анатолии Ивановиче Моисееве можно рассказывать много. Я приведу рассказ, который слышал от Плишкина. Однажды он (Плишкин) проспал и не успевал на самолет. Спасти его мог только кто-нибудь из автомобилистов, подбросив до аэропорта на своей машине.

– Конечно отвезу, — сказал ему Анатолий Иванович, — Вот только напою тебя чаем. Ты наверняка еще не завтракал, раз такой запыхавшийся.

Плишкин попытался его убедить, что с чаем можно подождать до его возвращения, но Моисеев был не возмутим.

– Что ты, Юра, переживаешь. Машина — зверь («Москвич» первого выпуска). — У нас куча времени.

Наконец, они едут. Вдруг Моисеев сворачивает на обочину и останавливается. На вопрос «почему стоим», он ответил, что ему не нравится велосипедист впереди и нужно подождать, пока их обгонит другая машина. Действительно, обогнавший их чудак сбил велосипедиста на ближайшем перекрестке.

– Видишь, Юра, как у нас все удачно складывается, — прокомментировал это событие Моисеев.

На этом рассказ обрывается. Видимо, на самолет Плишкин опоздал, а рассказывать о своих неудачах он очень не любил.

Вместо эпилога

Пиша свои воспоминанья

О результатах этих встреч,

Себе на славы, ни признанья

Я не ищу. — О чем тут речь.

Все эпиграфы, эпилог и слова, набранные курсивом, взяты из книги В.Е. Щербинина «Мемуары, или моя роль в развитии физики».

Аналитический отчет о XXI Всероссийской школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества

1. Общая статистическая информация

XXI Всероссийская школа — семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-21) проводилась с 18 по 25 марта 2021 г. на б/о «Солнечный остров» в с. Мостовское Верхнепышминского района Свердловской области. Организаторами СПФКС-21 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 ИФМ УрО РАН, УрО РАН. Спонсорами-участниками школы-семинара выступили ООО "SERNIA ИНЖИНИРИНГ"и МНИЦ "Когерентная рентгеновская оптика". Школа-семинар СПФКС-21 проводилась в формате научной конференции с элементами образовательной направленности. Большинство участников СПФКС-21 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 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, Черноголовки, Санкт-Петербурга, Вроцлава (Польша), Омска, Челябинска, Екатеринбурга, Калининграда, Махачкалы, Новосибирска. Общее количество зарегистрированных участников школы-семинара составило 346 человек, в том числе 6 иностранных участников из Польши, Ирана, Азербайджана и Украины. Состав участников: 1 член - корреспондент РАН, 23 доктора наук, 84 кандидата наук, 238 учёных без степени. В 2021 г. в сборник тезисов вошло 293 тезиса доклада. Всего в ходе проведения школы-семинара было сделано 236 докладов, из них: лекций (приглашенных докладов) — 32, устных докладов (кратких сообщений) — 94, стендовых докладов — 110. В СПФКС-21 приняли участие докладчики из 17 городов РФ, представляющие 45 научных и образовательных учреждения. 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-21 и предыдущих конференций, размещена в сети Интернет по адресу https://spfks.imp.uran.ru.

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-21, 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 общим временем сессий.

Таблица 1. Категории докладов.

Год	**Всего**	**Лекции**	**Устные**	**Стендовые**	**Заочные**
2007	77	19 (25%)	39 (51%)	19 (25%)	н/д
2008	176	19 (10.8%)	73 (41.5%)	49 (27.8%)	35 (19.9%)
2009	244	27 (11.1%)	83 (34.0%)	119 (48.8%)	15 (6.1%)
2010	206	24 (11.7%)	63 (30.6%)	95 (46.1%)	24 (11.7%)
2011	155	19 (12%)	46 (29.3%)	55 (35%)	35 (22.3%)
2012	231	27 (11.7%)	73 (31.6%)	86 (37.2%)	42 (18.2%)
2013	273	27 (10%)	78 (28.6%)	106 (38.8%)	62 (22.7%)
2014	223	20 (9%)	76 (33%)	59 (26%)	68 (30.0%)
2015	203	23 (11%)	60 (29%)	55 (27%)	65 (32.0%)
2016	240	26 (10%)	71 (29%)	87 (36%)	56 (23.0%)
2017	224	27 (12%)	89 (40%)	91 (41%)	17 (7.0%)
2018	210	29 (14%)	108 (51%)	73 (35%)	0
2019	230	30 (13%)	102 (44%)	98 (43%)	0
2021	293	32 (11%)	94 (32.1%)	110 (37.5%)	57 (19.4%)

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%)
2021	1 (0.3%)	23 (7.9%)	84 (28.7%)	129 (44%)	56 (19.1%)

* 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 2021 г. составляли 34% от общего количества докладчиков. Как количественный, так и процентный состав участников из других регионов России растет пятый год подряд и впервые процентный состав иногородних докладчиков превысил 50%. 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%)
2021	46 (15.7%)	20 (6.8%)	3 (1%)	53 (18%)	155 (53%)	6 (2%)	132 (45%)

* 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

Научная программа СПФКС-21 включала следующие разделы: Магнитные явления, Фазовые переходы и критические явления, Проводимость и транспортные явления, Оптика и спектроскопия, Резонансные явления, Структурные и механические свойства твёрдых тел, Неразрушающий контроль, Теплофизика, Электрофизика, Наноматериалы, Биофизика, Теоретическая физика, Сверхпроводимость и физика низких температур. В научной программе представлен широкий спектр основных проблем современной физики конденсированного состояния вещества. Отметим, что на семинаре существует традиция приглашать нескольких докладчиков из смежных областей физики, представителей различных высокотехнологичных отраслей промышленности, а также биологии или медицины. Такая политика способствует расширению кругозора молодых специалистов и представляется полезной в плане развития междисциплинарного научного сотрудничества. Распределение тематики докладов по секциям приведено в таблице 4: Как следует из таблицы 4, популярность секции «Магнитные явления» на СПФКС традиционно превосходит все остальные направления — 28,6% в 2021 г. (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.

В день открытия школы-семинара 18 марта 2021 г. с приглашенными докладами выступили профессор Норман Генри Эдгарович «Суперкомпьютерное атомистическое многомасштабное моделирование», профессор Терещенко Олег Евгеньевич «Вакуумная и твердотельная спинтроника», профессор Алисултанов Заур Замирович «Неэрмитовы вейлевские фермионы типов 3 и 4», д.ф.-м.н. Рыльцев Роман Евгеньевич «Методы машинного обучения в физике конденсированного состояния», д.ф.-м.н. Прудников Павел Владимирович «Моделирование критических свойств сложных систем» и д.ф.-м.н. Васин Михаил Геннадьевич «Критическая динамика бозонной системы вблизи квантового фазового перехода». Практически

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

Секция / Год	**2016**	**2017**	**2018**	**2019**	**2021**
Магнитные явления	61 (25.1%)	39 (16,6%)	48 (21.7%)	46 (20%)	84(28.6%)
Фазовые переходы и крит. явления	19 (7.8%)	20 (9%)	27 (12.2%)	31 (13.5%)	44(15%)
Проводимость и транспорт	16 (6.6%)	12 (5.4%)	16 (7.2%)	26 (11.3%)	12(4%)
Оптика и спектроскопия	12 (4.9%)	23 (10.3%)	11 (4.9%)	9 (3.9%)	35 (12%)
Резонансные явления	7 (2.9%)	8 (3.6%)	6 (2.7%)	3 (1.3%)	2(0.7%)
Структурные и механические св-ва	21 (8.6%)	29 (13%)	22 (10%)	29 (12.6%)	35(12%)
Неразрушающий контроль	8 (3.3%)	5 (2.2%)	3 (1.4%)	7 (3%)	4(1.4%)
Теплофизика	17 (7%)	14 (6.3%)	21 (9.5%)	22 (9.7%)	14(4.8%)
Электрофизика	9 (3.7%)	6 (2.8%)	9 (4.1%)	6 (2.6%)	5(1.7%)
Наноматериалы	34 (14%)	37 (16.5%)	13 (5.8%)	13 (5.7%)	27(9.2%)
Биофизика	7 (2.9%)	2 (0.9%)	9 (4.1%)	10 (4.3%)	4(1.4%)
Теория КС	32 (13.2%)	26 (11.6%)	16 (7.2%)	20 (8.7%)	23(7.8%)
Сверхпроводимость и ФНТ	0	2 (0.9%)	10 (4.5%)	8 (3.5%)	4(1.4%)

все эти доклады объединяет то, что они посвящены компьютерному моделированию различных физических систем. Представители разных научных школ из Москвы, Новосибирска, Махачкалы, Екатеринбурга, Омска рассказывали о своих и чужих успехах процессов моделирования, а также об ограничениях и сложностях моделирования и машинного обучения многомерных систем.

В пятницу 19 марта 2021 года в первой половине дня проходила секция «Теплофизика». Она включала в себя доклады научных сотрудников и аспирантов Института теплофизики УрО РАН (ИТФ УрО РАН), а также доклады приглашенных лекторов из города Екатеринбурга. ИТФ УрО РАН представил Скрипов Павел Владимирович, выступивший с лекцией «Теплофизические свойства растворов хладагентов в компрессорных маслах: к 75-летию профессора Виталия Петровича Железного». Вузовскую науку от Российского государственного профессионально-педагогического университета представил Ивлиев Андрей Дмитриевич, который выступил с докладом «Высокотемпературная проводимость редкоземельных металлов и сплавов в твердом состоянии».

В устных докладах участники секции представили результаты своих экспериментальных исследований, посвященных изучению переноса тепла и теплообмена в стабильных и неустойчивых состояниях, а также оценке критических параметров и условий вскипания жидких сред. Затронули вопросы истечения струй перегретых жидкостей через каналы. Кроме того, полученные в институте результаты расчетов и компьютерного моделирования метастабильных состояний были представлены на теоретической секции, проходившей параллельно с основной.

Во второй половине дня пятницы 19 марта 2021 года научную секцию открыл Коренев Пётр Александрович из Москвы с приглашенным докладом «Выращивание алмазных пластин высокой чистоты методом MW-PACVD в микроволновом плазменном реакторе». Также с приглашенными докладами выступили д.ф.-м.н. Коплак Оксана Вячеславовна «Инженерия наноструктур для медицинской спинтроники» (г. Черноголовка) и д.ф.-м.н. Григорьев Сергей Валентинович «Киральные спиновые структуры в нецентросимметричных кубических кристаллах» (г. Санкт-Петербург). Григорьев С.В. в своем докладе рассказал об исследовании свойств нецентросимметричных кристаллов (MnSi, $Fe_{1-x}CoxSi$, FeGe, MnGe и др.), являющихся геликоидальными кубическими магнетиками. Основным методом исследования являлась малоугловая дифракция поляризованных нейтронов.

Устные доклады касались магнитной доменной структуры в тонких пленках, процессов перемагничивания микроигл различной геометрии, а также магнитных свойств сталей, в том числе изготовленных с помощью 3D печати.

В субботу 20 марта 2021 года проходила секция «Структурные и механические свойства твердых тел», на которой ученые, аспиранты и студенты докладывали о результатах исследования структуры и свойств композитов, титиновых сплавов, графита, сплавов на основе Fe-Ni, сложных оксидов. С лекциями выступили профессор Беккер Татьяна Борисовна «Физико-химические аспекты получения функциональных кристаллических материалов» (г. Новосибирск), д.ф.-м.н. Стегайлов Владимир Владимирович «Атомистическое моделирование радиационных повреждений радиационных повреждений материалов ядерной энергетики: диффузия нанополостей» (г. Москва), Манцевич Владимир Николаевич «Динамическая спиновая поляризация в гибридных полупроводниковых наноструктурах» (г. Москва), д.ф.-м.н. Григорьев Павел Дмитриевич «Анизотропный сверхпроводящий переход в квазидвумерных проводниках» (г. Черноголовка). На круглом столе выступил Григорьев Сергей Валентинович на тему «Логарифмические фракталы в живой природе» (г. Санкт-Петербург). Он рассказал, что в природе структуры часто строятся многократным повторением одного и того же морфогенетического механизма, например, ветвления. Предложен простой экспериментальный способ демонстрации структуры дерева как логарифмического фрактала. Для классификации фрактальных объектов в трехмерном пространстве используются методы малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского рассеяния (МУРН и МУРР).

Вечером в субботу 20 марта 2021 года проходила стендовая секция, на которой было представлено свыше 50 докладов по биофизике, наноматериалам, неразрушающему контролю, структурным и механическим свойствам твердых тел, теории конденсированного состояния вещества, фазовым переходам и критическим явлениям. Доклады преимущественно делали молодые ученые из академических институтов и ВУЗов, а также студенты и аспиранты.

В этом году в рамках школы-семинара СПФКС впервые проводилась секция, посвященная исследованиям на установках класса Мегасайенс. В рамках секции, которая проходила в первой половине дня 21 марта 2021 г. были прочитаны две лекции. Приглашенными докладчиками стали Анатолий Александрович Снигирев, директор МНИЦ "Когерентная рентгеновская оптика для установок Мегасайенс"БФУ им. И.Канта (г. Калининград) и Алексей Александрович Велигжанин, начальник отдела синхротронных экспериментальных станций Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований НИЦ "Курчатовский институт"(г. Москва). В своей лекции Снигирев А.А. рассказал о новых методах исследования материалов на основе когерентной рентгеновской оптики для синхротронов нового поколения. Обзор таких высокоточных методов как рентгеновская высокоразрешающая микроскопия, фазово-контрастная визуализация, рефлекто-интерферометрия позволили слушателям узнать о последних достижениях и современных возможностях использования синхротронного излучения для исследования различных типов материалов. Приглашенный доклад Велигжанина А.А. был посвящен рентгеновской спектроскопии поглощения, которая в общем случае объединяет два метода исследования — спектроскопию прикраевой тонкой структуры спектров поглощения (NEXAFS — Near Edge X-ray Absorption Fine Structure) и спектроскопию протяженной тонкой структуры спектров поглощения рентгеновских лучей (EXAFS — Extended X-ray Absorption Fine Structure). В лекции обсуждались физические основы метода, особенности его реализации с использованием экспериментального оборудования, а также методы обработки экспериментальных данных.

Кроме приглашенных докладов на секции было представлено 10 устных докладов. В представленных докладах рассматривались фундаментальные аспекты материаловедения и фи-

зики взаимодействия излучения с веществом, новые методы диагностики и технические решения для оснащения экспериментальных станций действующих и будущих синхротронов, а также результаты исследований электронной структуры переходных металлов с помощью использования методов фотоэлектронной спектроскопии.

Во второй половине дня 21 марта 2021 г. прозвучали 2 приглашенных доклада. Докладчиками были представитель Института спектроскопии РАН (г. Троицк) Болдырев Кирилл Николаевич и представитель Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН (г. Екатеринбург) Дружинин Анатолий Владимирович. Болдырев К.Н. прочитал лекцию на тему «Перспективы применения металлорганических перовскитов в фотонике и фотовольтаике». В лекции был сделан обзор физических свойств, возможных и уже реализованных применений, а также приведены новые данные, полученные в результате проведения высокопрецизионных спектроскопических исследований гибридных металлорганических перовскитов.

На стендовой секции 21 марта 2021 г. было представлено около 60 докладов по магнитным явлениям, оптике и спектроскопии, проводимости и транспортным явлениям, резонансным явлениям в конденсированных средах.

В понедельник 22 марта 2021 г. на школе-семинаре СПФКС была проведена секция, посвященная исследованию твердотельных магнитокалорических материалов, где акцент делался на обсуждении новых результатов и последних достижениях в области магнитокалорических исследований, актуальных фундаментальных и прикладных задачах, прогрессивных идеях в технологии магнитного охлаждения. На секцию были приглашены и выступили с лекциями как ведущие специалисты по магнитокалорике, так и молодые научные сотрудники (аспиранты, студенты), только начинающие свою путь в науке. Было заслушано 7 устных докладов. Тематика секции охватывала весь спектр проблем, связанных с магнитокалорических эффектом: новые материалы с гигантским калорическим и связанным с ним эффектами, теория и численное моделирование перспективных калорических материалов, а также их практические приложения. Были заслушаны шесть приглашенных докладов: «Альтернативные технологии магнитного охлаждения на основе фазовых переходов в твердых телах» (В.В. Коледов, ИРЭ РАН), «Сплавы и соединения для магнитного охлаждения при комнатных и криогенных температурах: ретроспектива и перспективы» (В.В. Ховайло МиСИС), «Методы исследования магнитокалорического эффекта в циклических магнитных полях» (А.М. Алиев ИФ ДФИЦ РАН), «Теоретические подходы к описанию магнитокалорического эффекта в ферромагнитных сплавах» (В.В. Соколовский ЧелГУ), «Методы создания и применение высоких магнитных полей для исследований перспективных магнитокалорических материалов» (Ю.С. Кошкидько, ILTS, Польша), «Мультикалорические материалы и эффекты» (А.А. Амиров, БФУ).

Кроме докладов по магнитокалорическому эффекту, были заслушаны 4 устных доклада по физике магнитных явлений, посвященные подвижности магнитного геликоида в нанослое гольмия (Заворницын Р.С.), процессам перемагничивания в наноструктурированных сплавах системы Pr-Fe-B (Мальцева В.Е.), процессам перемагничивания в постоянных магнитах систем Nd-Fe-B и Sm-Co (Уржумцев А.Н.), а также функциональным пленочным наноструктурам с гигантским магнитным импедансом (Членова А.А.). С лекциями выступили представители Уральского федерального университета (г. Екатеринбург) Незнахин Дмитрий Сергеевич «Особенности магнитной анизотропии высокоанизотропных интерметаллических соединений» и Волегов Алексей Сергеевич «Аддитивное производство постоянных магнитов и магнитных систем». В своей лекции Незнахин Д.С. рассказал об явлении анизотропии намагниченности, впервые теоретически предсказанном в 1960 году, а эксперимен-

тально обнаруженном только в 1971 году. На современном этапе работы на монокристаллах YCo3, LuCo3 и Y2Co7 удалось обнаружить ярко выраженное явление анизотропии намагниченности, параметра анизотропии намагниченности и констант магнитокристаллической анизотропии K1 и K2. Разница величины намагниченности насыщения вдоль осей легкого и трудного намагничивания достигало 9%. Волегов А.С. рассказал о проблематике и перспективах создания постоянных магнитов с помощью аддитивного производства. Потенциально с помощью 3D печати возможно создавать магниты произвольной формы и размеров, что открывает новые горизонты в технике.

Приглашенный лектор из Екатеринбурга, д.ф.-м.н. Сон Леонид Дмитриевич 23 марта 2021 г. прочитал лекцию на тему «Релаксация вблизи бинодали», вызвавшая повышенный интерес у представителей теплофизической секции и специалистов, занимающихся молекулярным моделированием. Приглашенный лектор Дёмин Александр Михайлович из Института органического синтеза им. академика И.Я. Постовского УрО РАН (г. Екатеринбург) выступил с лекцией «Дизайн наноматериалов для диагностики и терапии рака». Он рассказал о новых трендах в лечении злокачественных опухолей с применением комплексного подхода, основанного на применении магнитных наночастиц в комбинации с химиотерапией.

Школу-семинар СПФКС-21 посетил молодой член-корреспондент РАН Стрельцов Сергей Владимирович из Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН (г. Екатеринбург). Он прочитал лекцию о спин-орбитальном взаимодействии в 4D-5D оксидах переходных металлов. В своем докладе Стрельцов С.В. отметил, что изучение влияния спин-орбитального взаимодействия на физические свойства различных материалов - одна из ключевых областей физики конденсированного состояния в последние годы. Был сделан обзор последних результатов исследований, связанных с изучением влияния спин-орбитального взаимодействия на кристаллическую решетку, орбитальные или спиновые степени свободы.

На основной секции было заслушано 10 устных докладов по спектроскопии, ЯМР исследованиям, магнитным свойствам наноструктурированных пленок и противокражных систем. На теоретической секции было заслушано 9 устных докладов по сверхпроводимости, магнетизму и электронной структуре.

В последний рабочий день проведения школы-семинара СПФКС 24 марта 2021 г. была проведена секция по электрофизике, на которой участники доложили об изучении свойств композитов на основе титана, создании новых индукторов, генерировании мощных коротких импульсов, электрохимических ячейках, электрофизических свойствах нанокомпозитов. Лекции прочитали представители Института металлургии УрО РАН (г. Екатеринбург) д.т.н. Заякин Олег Вадимович и Института электрофизики УрО РАН (г. Екатеринбург) Спирин Алексей Викторович. Заякин О.В. сообщил о фундаментальных основах эффективной переработки техногенных отходов ферросплавного производства, а Спирин А.В. — о получении и свойствах проводников с градиентной электропроводностью для разработки индукторов сильного магнитного поля.

Во второй половине дня были заслушаны доклады об антиоксидантной активности наночастиц диоксида церия, о создании новых чувствительных сенсоров газов, об изучении свойств тонких пленок и наноструктурированного диоксида титана. Научную программу завершила лекция на общеобразовательную тему «Леса «шагают» в горы». Ее прочитал научный сотрудник Института экологии растений и животных УрО РАН (г. Екатеринбург) Григорьев Андрей Андреевич.

После завершения научной программы состоялось подведение итогов и закрытие школы-семинара. Было проведено награждение аспирантов и студентов, чьи доклады были признаны лучшими экспертной комиссией из состава программного комитета школы-семинара.

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-21 было принято решение о проведении следующей, двадцать второй Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-22) в 2022 г.

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

Лекции

Магнитокалорический эффект в переменных магнитных полях

А.М. Алиев
Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e–mail: lowtemp@mail.ru

Исследования магнитокалорического эффекта (МКЭ) начались более ста лет назад, но интерес к этому эффекту только растет в настоящее время. Исследование МКЭ имеет как фундаментальный, так и прикладной характер. С фундаментальной точки зрения, исследование МКЭ позволяет получить важную информацию о характере магнитного упорядочения, обменных и магнито-кристаллических взаимодействиях, об изменениях магнитных структур под действием магнитного поля. С прикладной точки зрения, интерес к МКЭ обусловлен возможностью создания твердотельных магнитных холодильных машин.

В настоящее время для исследования МКЭ используются различные методы, как косвенные, так и прямые. Наиболее часто для оценок магнитокалорических характеристик используют температурные и магнитополевые зависимости намагниченности, и с помощью соотношений Максвелла делается косвенная оценка МКЭ. Максимальных значений величин изменения температуры и энтропии следует ожидать в окрестностях магнитных фазовых переходов. Вблизи температуры фазового перехода первого рода, в силу необратимости фазовых переходов, соотношение Максвелла становится некорректным, и вычисленные значения изменения энтропии с помощью соотношений Максвелла приводят к получению сильно завышенных значений. Поэтому наиболее достоверные оценки МКЭ можно получать только прямым методом. Но классические прямые методы также имеют ряд недостатков, прежде всего — малая температурная чувствительность, в силу чего для исследований требуются массивные образцы и сильные магнитные поля. С фундаментальной точки зрения наиболее интересные результаты можно получить в слабых магнитных полях, в которых классическим прямым методом сложно исследовать МКЭ. С другой стороны, в реальных магнитных холодильных машинах магнитокалорические материалы будут подвергаться долговременному (как минимум несколько лет) периодическому воздействию магнитного поля, и необходимо знать о поведении материалов при таких условиях. Для таких исследований классический прямой метод тоже неудобен для использования. Поэтому возникла необходимость разработки новой методики измерения МКЭ, с высокой температурной чувствительностью, и возможностью исследования МКЭ в долговременных циклических магнитных полях. В данном докладе приводятся описание разработанной нами методики прямого измерения МКЭ в циклических магнитных полях, разработанных различных источников циклических магнитных полей, а также полученные основные результаты, в том числе:

- результаты исследования МКЭ в слабых магнитных полях;
- результаты исследования влияния долговременного приложения циклического магнитного поля на магнитокалорические свойства материалов;
- результаты исследования влияния частоты магнитного поля на МКЭ и некоторые другие результаты.

На основе полученных результатов делаются выводы о роли МКЭ при исследовании фундаментальных свойств магнитных материалов, а также о перспективах практического использования исследованных магнитокалорических материалов.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РНФ № 22-19-00610.

Спектральные потоки и монополи Берри-Черна в эрмитовых и неэрмитовых топологических системах

З.З. Алисултанов

Московский Физико-Технический Институт (МФТИ), Долгопрудный, Россия
Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e–mail: zaur0102@gmail.com

В этом докладе приводится обзор основных идей концепции соответствия между спектральными потоками, часто связанными с однонаправленными киральными модами и числами Черна, связанными с точками вырождения. В качестве конкретных примеров будут обсуждаться двумерное уравнение Дирака с неоднородной массой (модель Джакива-Ребби), трехмерные вейлевские фермионы в квантующем магнитном поле, модель Халдейна (черновский изолятор и долинный квантовый эффект Холла). Кроме того, будет обсуждаться концепция спектральных потоков для неэрмитовых вейлевских фермионов. Помимо обзора будут представлены и некоторые оригинальные результаты и идеи.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-72-00110.

1. Z.Z. Alisultanov, E.G. Idrisov, arxiv.2110.13714

2. З.З. Алисултанов, Г.О. Абдуллаев, П.Д. Григорьев, Н.А. Демиров, ЖЭТФ **162** (2022) (в печати).

Стекольный переход как топологический фазовый переход в упругой среде

М.Г. Васин[1,2*], К.Я. Шкляев[3,4]

[1]Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
[4]Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия
*e–mail: dr_vasin@mail.ru

Микроскопические механизмы, которые порождают стекольное состояние вещества, до сих пор остаются предметом обсуждения. В частности, дискуссионным остаётся вопрос: можно ли рассматривать стёкла как предельно вязкие жидкости, либо стекольная фаза является результатом подлинного термодинамического фазового перехода в твёрдое состояние [1]. В представленном докладе приведены аргументы в пользу второго утверждения и показано, что переход в стекольную фазу в полной мере можно описать как фазовый переход в системе топологических дефектов, т.е. как топологический фазовый переход.

Этот подход не нов. Теоретическое описание стекольной фазы как замороженной системы топологически устойчивых дефектов активно развивалось в конце прошлого века (см., например, [2,3]). Тогда же было предположено, что переход в стекольное состояние является топологическим фазовым переходом [4].

В представленном докладе предложено развитие этого подхода. Показано, что в трёхмерной системе топологических дефектов может происходить фазовый переход, описание которого сводится к простой модели с эффективным гамильтонианом

$$H = (\nabla \mathbf{A})^2 + a(T - T^*)(\mathbf{A}^2/2 - \mathbf{A}^4/4!) + b\mathbf{A}^6/6! + \mathbf{JA}, \qquad (1)$$

где T^* — температура Фогеля-Фулчера, $\mathbf{A}$ — эффективное (калибровочное) поле, описывающее взаимодействие между топологическими дефектами $\mathbf{J}$, а наблюдаемые величины связаны с корреляционной функцией $\langle \mathbf{JJ} \rangle^2 \sim \exp\langle \mathbf{AA} \rangle$. Такая система характеризуется наличием двух пространственных масштабов: радиуса взаимодействия, обратно пропорциональным массе поля $\mathbf{A}$, и корреляционного радиуса топологических дефектов, который с приближением температуры к T^* растёт значительно быстрее радиуса взаимодействия. Используя методы неравновесной (критической) динамики можно показать, что этот масштаб пропорционален времени релаксации, расходимость которого при $T \to T^{*+}$ описывается уравнением Фогеля-Фулчера-Таммана, а температура стекольного перехода, $T_g > T^*$, зависит от скорости охлаждения [5]. Но, пожалуй, наиболее важным результатом является то, что в статическом пределе данная модель демонстрирует большинство свойств, характерных для стекольного перехода: при $T \to T^{*+}$ теплоёмкость системы быстро падает, а восприимчивость резко возрастает на конечную величину. В то же время нелинейные восприимчивости третьего, χ_3, и пятого, χ_5, порядка при $T \to T^{*+}$ расходятся, причём $\chi_5 \sim \chi_3^2$, что согласуется с недавно полученными экспериментальными данными [1].

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 21-13-00202.

1. S. Albert, Th. Bauer, M. Michl, G. Biroli, J.P. Bouchaud, A. Loidl, P. Lunkenheimer, R. Tourbot, C. Wiertel-Gasquet, and F. Ladieu, Science **352**, 1308 (2016).
2. D.R. Nelson, Phys. Rev. B **28**, 5515 (1983).
3. N. Rivier, Rev. Bras. Fis., **15**, 311 (1985).
4. И.Е. Дзялошинский, С.П. Обухов, ЖЭТФ **83**, 813 (1982).
5. M.G. Vasin, V.M. Vinokur, Physica A **525**, 1161 (2019).

Проект компактного источника нейтронов DARIA для исследований методами нейтронного рассеяния

С.В. Григорьев
НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ, Гатчина, Россия
e–mail: grigoryev_sv@pnpi.nrcki.ru

Представлена российская инициатива создания компактного источника нейтронов на базе ускорителя протонов — проект DARIA (compact neutron source Dedicated to Academic Research and Industrial Applications). Целью проекта является разработка и создание сначала прототипа, а затем сети компактных источников нейтронов для нужд нейтронного рассеяния. Основные элементы источника:

1. Протонный ускоритель, состоящий из ЭЦР источника и ускоряющих структур до 13 МэВ, обеспечивающих формирование импульсной структуры пучка на бериллиевой мишени с высоким пиковым током до 100 мА и частотой до 200 Гц [1,2]. Энергия протонов будет ограничена сверху 13 МэВ, так как ее дальнейшее увеличение приведет к генерации трития мишени, что нежелательно для источника, размещаемого в образовательных учреждениях.

2. Мишенная сборка. Для создания нейтронов будет использоваться реакция столкновения протонов с ядрами бериллия, обеспечивающая выход нейтронов, достаточный для исследований в физике конденсированного состояния, при умеренном выделении тепла [3]. Компактные размеры мишени (около 5 см в диаметре и 1.1 мм в толщину) обеспечат относительно высокую плотность потока нейтронов. Низкие размеры мишени и теплового замедлителя, размещаемого внутри мишенной сборки, позволяют использовать компактную биологическую защиту. Разрабатывается система охлаждения, позволяющая отводить около 40 кВт среднего тепловыделения с мишени и ее окружения.

3. Инструменты нейтронного рассеяния. При указанных выше параметрах ускорителя и мишени возможно добиться плотности потока нейтронов в импульсе до 2×10^{14} н/с/см^2, что приравнивает компактный источник нейтронов по своим научным возможностям к исследовательским реакторам средней мощности типа ВВР. Нейтронные установки оптимизируются совместно с соответствующими им замедлителями нейтронов. Конкретный перечень нейтронных станций может варьироваться в зависимости от потребностей центра. На примере нескольких методов – дифракции, рефлектометрии, малоуглового рассеяния нейтронов – предложены экспериментальные схемы реализации методов нейтронного рассеяния.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения No.075-15-2021-1358 от 12 октября 2021г).

1. G. Kropachev *et al.*, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **13**, 1126 (2019).

2. . С.В. Барабин *и др.* , Письма в журнал технической физики, **47**, 7 (2021).

3. V.V. Subbotina *et al.*, Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A **1008**, 165462 (2021).

Теория косвенных обменных взаимодействий в гетероструктурах Fe/Cr с эффектом гигантского магнитосопротивления

С.А. Гудин

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

Памяти Михаила Ивановича Куркина (13.08.1938-19.01.2022), идейного вдохновителя и соавтора.

В 1988 г. после открытия эффекта гигантского магнитосопротивления (GMR) в магнитных гетероструктурах Fe/Cr началось интенсивное изучение электрических и магнитных свойств таких многослойных пленок с нанометровой толщиной отдельных слоев Fe и Cr.

Разработана теория [1-8], описавшая основные магнитные свойства в многослойных пленках железо/хром, обладающих эффектом гигантского магнитосопротивления. Теория основывается на следующих предположениях: 1. слои железа ферромагнитны, а магнитная (антиферромагнитная) структура хрома имеет вид поперечной линейно поляризованной волны спиновой плотности (лВСП); 2. обменное взаимодействие железо-хром считается слабым возмущением по сравнению с обменными взаимодействиями внутри слоев железа и хрома, поэтому учитывались поправки первого и второго порядка теории возмущений; 3. относительная величина этих поправок зависит от степени шероховатости границ раздела Fe/Cr, считалось, что размер шероховатостей имеет нанометровый масштаб. Показано, что при таких приближениях взаимная ориентация намагниченностей слоев железа может быть параллельной, антипараллельной и неколлинеарной. Определены границы устойчивости этих структур в зависимости от толщины прослойки хрома и величины отношения поправок первого и второго порядка, построена фазовая диаграмма магнитных структур пленок Fe/Cr/Fe. Полученная фазовая диаграмма использовалась для расчета поведения фазы лВСП во внешнем магнитном поле. Вычислены условия потери устойчивости, при которых фаза лВСП меняется скачком в магнитном поле. Теория позволила объяснить экспериментально обнаруженные магнитные аномалии: 1) существование двух периодов осцилляций на зависимости магнитных свойств пленок от толщины прослойки хрома, 2) формирование неколлинеарных ориентаций намагниченностей соседних слоев железа, 3) выход кривой начального намагничивания за пределы петли гистерезиса перемагничивания.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ «Квант» No. АААА-А18-118020190095.

1. В.В. Устинов, М.И. Куркин, ФММ **96**, 13, (2003).
2. М.И. Куркин, С.А. Гудин *и др.*, ФММ **96**, 21 (2003).
3. М.И. Куркин, С.А. Гудин *и др.*, ФММ **98**, 8 (2004).
4. S.A. Gudin, A.V. Gapontsev *et al.*, JMMM **300**, E553 (2006).
5. С.А. Гудин, А.В. Гапонцев *и др.*, ФММ **107**, 232 (2009).
6. Н.Б. Бакулина, М.И. Куркин *и др.*, ФТТ **52**, 307 (2010).
7. S.A.Gudin, M.I. Kurkin *et al.*, Sol. St. Phen. **130**, 478 (2012).
8. S.A.Gudin, M.I. Kurkin *et al.*, JMMM **324**, 4106 (2012).

Современные нанокомпозитные магнитные материалы для терапии и диагностики рака

А.М. Дёмин

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

Рак считается ведущей причиной смерти в каждой стране мира. Так, например, по оценкам Всемирной организации здравоохранения (ВОЗ) в 2019 году, рак является первой или второй ведущей причиной смерти пациентов в возрасте до 70 лет в 112 из 183 стран [1]. В настоящее время огромное внимание уделяется повышению эффективности и уменьшению токсичности известных противоопухолевых препаратов (доксорубицин (Dox), паклитаксел (Ptx), метотрексат (Mtx), капмтотецин (Cpt) и др.) и созданию новых средств их доставки в опухолевые ткани.

В докладе рассмотрены примеры синтеза нанокомпозитных материалов на основе пористого SiO_2 и магнитных наночастиц (МНЧ), характеризующихся высокой сорбционной ёмкостью в отношении противоопухолевых препаратов, наличием магнитных свойств и биосовместимостью. Наличие магнитного ядра в композитах одновременно позволяет визуализировать их распределение в организме методами магниторезонансной томографии (МРТ) или магнитного имиджинга частиц (MPI), а также проводить терапию опухолей за счёт разогревания тканей высокочастотным магнитным полем выше 42°C (эффект магнитной гипертермии), облучением NIR (фотодинамический или фототермический эффекты) или высокоинтенсивным сфокусированным ультразвуком. Кроме того, такие средства доставки могут иметь выраженную способность к pH- или магнитоопосредованному высвобождению цитостатических препаратов. В результате этого можно достигать синергетического эффекта гипертермии и химиотерапии для лечения рака.

Особое внимание уделено дизайну оболочки нанокомпозитных материалов на основе SiO_2 и МНЧ Fe_3O_4. Использование поверхностно-активных веществ и варьирование условий нанесения SiO_2-покрытия может приводить к изменению их морфологии или к увеличению удельной площади поверхности наночастиц. Показано, что это позволяет увеличивать уровень загрузки на них биологически активных соединений, что продемонстрировано на примере иммобилизации на них противоопухолевого препарата Dox [2,3] или функционализации МНЧ pH-зависимым встраивающимся пептидом (pHLIP) [4,5]). Полученные материалы могут рассматриваться как потенциальные средства доставки противоопухолевых препаратов или средства визуализации опухолей методом МРТ.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания на 2022 год (АААА-А19-119011790130-3).

1. H. Sung, J. Ferlay, R.L. Siegel *et al.*, CA Cancer J. Clin. **71**, 209 (2021).

2. A.M. Demin, A.V. Vakhrushev, A.G. Pershina *et al.*, Int. J. Mol. Sci. **23**, 9093 (2022).

3. A.M. Demin, A.V. Vakhrushev, M.S. Valova *et al.*, Pharmaceutics **14**, 2271 (2022).

4. A.G. Pershina, O.Ya. Brikunova, A.M. Demin *et al.*, Nanomedicine: NBM, **32**, 102317 (2021).

5. A.M. Demin, A.G. Pershina, A.S. Minin *et al.*, ACS Appl. Mater. Interfaces **13**, 36800 (2021).

Спиновая диаграммная техника в задачах аналогового квантового моделирования

А.А. Елистратов

Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва, Россия
e–mail: andrei.a.elistratov@mail.ru

В настоящее время мы наблюдаем реинкарнацию интереса к спиновым системам, связанную с бурным развитием как квантовых вычислений, так и квантового аналогового моделирования. Квантовым аналоговым моделированием называется метод исследований, когда сложная и малодоступная для экспериментального наблюдения квантовая система заменяется более простой и контролируемой системой, имеющей качественно аналогичное поведение. В качестве таких, заменяющих, систем выступают системы кубитов, холодные атомы в оптической решетке, фотоны в оптических процессорах и т.д. С их помощью изучаются модели Изинга, Гейзенберга, Хаббарда, Андерсона и др., созданные изначально для описания явлений в твердом теле.

Серьезной проблемой при теоретическом изучении спиновых систем является неабелев характер спиновых операторов, по причине которого их коммутатор равен не c-числу, как у фермионов и бозонов, а снова спиновому оператору. Это обстоятельство затрудняет построение диаграммной техники в виде, привычном для теоретиков, занимающихся бозе- и фермисистемами. И все же Вакс, Ларкин, Пикин, в своей работе [1] предложили подход, заключающийся в коммутации внутри среднего спиновых операторов с постепенным сокращением их количества. Можно назвать этот подход спиновым аналогом известной теоремы Вика. Кроме того, авторы [1] сформулировали основы спиновой диаграммной техники. На основе этого результата уральская группа ученых — Изюмов, Кассан-Оглы, Скрябин, и др. [2] — продолжила разработку диаграммной техники для спиновых систем и исследовала с ее помощью модели Изинга и Гейзенберга. К сожалению, эта мощная техника оказалась примененной к очень ограниченному кругу моделей и практически не встречается сейчас в периодической научной литературе.

В нашей работе данная диаграммная техника впервые применена для анализа спин-бозонной модели. В частности, рассчитан автокоррелятор продольных компонент спина, погруженного в бозонный резервуар. Результат верифицирован при помощи расчета с использованием фермионизации Попова-Федотова.

Другим примером успешного применения обсуждаемой техники стал расчет S-матрицы, описывающей прохождение микроволновых фотонов через кубит, соединенный с открытым резонатором. Полученное для двухфотонной матрицы рассеяния выражение совпало с выражением для некогерентной части триплета Маллоу, описывающего спектр вынужденной флуоресценции квантовой двухуровневой системы, в пределе малых накачек.

Отметим, что в обоих приведенных примерах спиновая диаграммная техника позволяет получить результат быстрее и проще, чем альтернативные методы.

В качестве заключения можно сделать вывод, что рассмотренная диаграммная техника имеет очень интересные перспективы применения в задачах аналогового квантового моделирования, однако, многие вопросы еще ждут своего решения.

1. В.Г. Вакс, А.И. Ларкин, С.А. Пикин, ЖЭТФ **26**, 188 (1968).
2. Ю.А. Изюмов, Ф.А. Кассан-оглы, Ю.Н. Скрябин, Полевые методы в теории ферромагнетизма, М.: Наука, 1974.

Фундаментальные основы создания новых ниобийсодержащих материалов для металлургии

О.В. Заякин

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e–mail: zferro@mail.ru

При легировании сталей и получении их высоких качественных характеристик особое место принадлежит ниобию. Его применение в последние десятилетия в России и во всем мире резко увеличилось. Если ранее ниобий использовался в основном для повышения коррозионной стойкости жаропрочных и нержавеющих сталей (1-2% Nb), то в настоящее время он применяется для упрочняющего эффекта во многих марках конструкционных сталей в десятых долях процента [1-3]. В РФ при наличии собственной минерально-сырьевой базы ниобия сложилась импортная зависимость в ниобиевой продукции. Доля импорта в потреблении феррониобия превышает 99%.

Разработаны основы сквозной схемы производства: ниобиевая руда — обогащение — ниобиевый ферросплав [4]. Основная масса феррониобия предназначена для микролегирования стали и может быть заменена на комплексные ферросплавы с пониженным содержанием ниобия. Предложена двухстадийная схема получения ниобиевых сплавов из бедных отечественных высокофосфористых черновых концентратов. На первой стадии пирометаллургической переработки карботермическим методом из бедного по ниобию концентрата с высоким содержанием вредных примесей получаем новый малофосфористый ниобийсодержащий оксидный материриал CaO-SiO_2-Nb_2O_5-TiO_2-FeO и металлический сплав Fe-P. На второй стадии процесса из малофосфористого оксидного материриала металлотермическим методом получаем новые комплексные сплавы Nb-Si-Fe-Ti, Nb-Al-Fe-Ti, Nb-Si-Al-Fe-Ti с низким содержанием вредных примесей. Перевод двухкомпонентной металлической системы Fe-Nb в многокомпонентную с вводом 20-40% Si и/или 10-30% Al приводит к изменению структуры и свойств сплавов, что способстует переводу ниобиевых ферросплавов из разряда тугоплавких в легкоплавкие материалы с температурой начала кристаллизации менее 1400°C. Комплексные ниобийсодержащие ферросплавы характеризуются более благоприятным служебным пакетом характеристик по сравнению со стандартным феррониобием, которые способствуют повышению степени усвоения Nb при использовании комплексного сплава для микролегирования стали и, в большинстве случаев, могут успешно заменить существующие марки феррониобия.

Развитие научных основ создания новых эффективных многокомпонентных ниобийсодержащих материалов для современных условий металлургии позволит решить стратегическую государственную задачу по удовлетворению внутреннего потребления и обеспечения промышленности России ниобиевыми материалами, начиная с переработки отечественного сырья до получения новых ниобиевых сплавов и стали, микролегированной ниобием.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00252, https://rscf.ru/project/21-19-00252/

1. L. Silvestre, P. Langenberg, T. Amaral et al., HSLA Steels Conference Proceedings, **931** (2015).

2. Е.Е.Никишина, Д.В. Дробот, Е.Н. Лебедева, Известия вузов. Цветная металлургия 1, **29** (2014).

3. В.И. Лисов, Редкие металлы России: Ресурс технологических инноваций – М. ЦентЛитНефтегаз (2018).

4. L.I. Leont'ev, V.I. Zhuchkov, O.V. Zayakin et al., Izvestiya. Ferrous Metallurgy **65**, 10 (2022).

Сверхпроводящие материалы для криомагнитного охлаждения и магнитолевитационного транспорта

А.П. Каманцев[1,2*], Д.А. Карпухин[1,2], В.В. Коледов[1,2], Ю.А. Терентьев[2]

[1]Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
[2]Научно-технический университет Сириус, Сочи, Россия
*e–mail: kaman4@gmail.com

Коммерческий успех тепловых насосов и холодильников на основе магнитных материалов с магнитокалорическим эффектом (МКЭ) в решающей степени зависит от рабочих характеристик используемых материалов. Был достигнут значительный прогресс в оптимизации свойств материалов для устройств, работающих вблизи комнатной температуры, однако множество сплавов проявляют сильный МКЭ в гораздо более широком диапазоне температур, например, сплавы на основе La-Fe-Si [1]. Это открывает возможность создания охлаждающих устройств для сжижения газов, таких как природный газ (150 К), кислород (90 К) или азот (77 К). Инновационная система криомагнитного охлаждения (КМО) позволит значительно сократить затраты на транспортировку сжиженных газов. Три ключевые отличительные черты, определяющие концепцию КМО: (1) сильное магнитное поле создаётся сверхпроводящим магнитом, который охлаждается сжиженным газом, подлежащим сохранению и транспортировке; (2) вакуумный зазор между сжиженным газом и внешним пространством (которое может быть заполнено другим сжиженным газом) обеспечивает как тепловую изоляцию, так и возможность организовать обратный цикл Карно для магнитного охлаждения; (3) каскадная цепь охлаждения — искусственно создается поток тепла от сжиженного газа в окружающую среду с мощностью, достаточной для компенсации естественного теплового потока из внешнего пространства в сжиженный газ [2].

Создание системы КМО позволит решить проблему длительного и недорогого поддержания криогенных температур, что, в свою очередь, откроет широкое применение эффектам сверхпроводимости и Мейснера, сильным магнитным полям на уровне десятков Тесла. Внедрение таких технологий сделает рентабельным эксплуатацию вакуумного магнитолевитационного транспорта (ВМЛТ), имеющего низкое энергопотребление, относительно дешевую инфраструктуру и позволяющего перевозить грузы с рабочей скоростью до 6500 км/ч и более, не нанося ущерб окружающей среде. Смысл разработанной концепции ВМЛТ под названием «квантовый гравилёт» [3] заключается в реализованном здесь механизме вертикальной и боковой стабилизации движения за счет квантовых эффектов сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниковых элементах из керамического материала YBaCuO. Управление движением транспорта за счет условно-бесплатной энергии гравитационного поля Земли позволяет использовать процессы рекуперативного перехода потенциальной и кинетической энергий в процессе движения. Гибкость и универсальность указанной технологии позволяет вписывать её практически в весь спектр отдельных составляющих интегральной транспортной системы, дополняя уже имеющиеся, менее энергетически эффективные транспортные технологии.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 20-37-51005.

1. S. Fujieda *et al.*, Applied Physics Letters **89**, 062504 (2006).
2. Д.А. Суслов *и др.*, ЧФМЖ **5**, 612 (2020).
3. Д.А. Карпухин *и др.*, ЖРЭ **8**, 20 (2021).

Кривая намагничивания и зонный ферромагнетизм

А.В. Королев

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

Зависимость намагниченности M образца от напряженности магнитного поля H, т.е. кривая намагничивания, несет богатую информацию о многочисленных магнитных свойствах вещества, имеющих чрезвычайно важное значение как для практического использования магнитных материалов, так и для решения задач физики магнитных явлений фундаментального характера, в частности, относящихся к ферромагнитным веществам. Одна из наиболее важных фундаментальных характеристик ферромагнетика является спонтанная намагниченность M_S и кривая намагничивания является, по существу дела, единственным инструментом, позволяющим найти ее достоверное значение. На практике определение этой характеристики, как правило, проводят, основываясь по умолчанию на модели эффективного (молекулярного) поля, и отождествляют с понятием намагниченности насыщения M_{SS}. Эта модель применима для неметаллического вещества с локализованным магнитными моментами на атоме. Модель достаточно успешно используют и для некоторых металлических веществ с сильной локализацией «магнитных» электронов. Однако в природе существуют металлические ферромагнетики, для которых эта модель принципиально не применима. Для таких ферромагнетиков кривую намагничивания следует рассматривать в модели зонного ферромагнетизма, основы которой заложил Эдмунд Стонер [1].

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Магнит», номер госрегистрации 122021000034-9).

1. E.C. Stoner , Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **165**, 372 (1938).

Разнообразие эффектов Холла

А.Ю. Кунцевич
Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
e–mail: alexkun@lebedev.ru

Эффект Холла, открытый более 140 лет назад, проявляется в том, что в магнитном поле, перпендикулярном току через образец, возникает напряжение в направлении перпендикулярном и полю и току, пропорциональное им. Данный эффект является основным способом для нахождения концентрации носителей в твердых телах, поскольку холловское напряжение в простейшем случае обратно пропорционально концентрации и не зависит от времени свободного пробега носителей (или подвижности).

У эффекта Холла оказалось много вариантов: аномальный, спиновый, квантовый, квантовый спиновый, квантовый аномальный, квантовый спиновый аномальный, долинный, нелинейный, планарный, тепловой, топологический, эффект Нернста и т.д.

Общим свойством всех вариантов эффекта Холла является определенное нарушение симметрии в системе. Новые квантовые материалы, для которых характерно сильное спин-орбитальное взаимодействие, инверсия зон и необычный закон дисперсии электронов, сильно обогатили физику эффекта Холла.

В настоящем обзоре рассматриваются основные идеи различных вариантов эффектов Холла и несколько недавно обнаруженных явлений: нелинейный [1], долинный [2] и планарный эффекты Холла в топологически нетривиальных материалах [3]. Показывается, что одним из основных механизмов эффекта Холла является поле Берри, эффективно присутствующее в кристаллическом материале, и отражающее нелинейность закона дисперсии, связанную с многозонным характером спектра.

Обсуждаются возможности инжиниринга эффекта Холла и его применения в новых материалах.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта МД-1571.2022.1.2.

1. K. Kang *et al.*, Nature Materials **18**, 324 (2019).
2. K.-F. Mak *et al.*, Science 344, 1489 (2014).
3. A.A. Taskin *et al.*, Nature Communications **8**, 1340 (2017).

Запутанные состояния в коррелированных квантовых точках

В.Н. Манцевич, Н.С. Маслова
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
*e–mail: vmantsev@gmail.com

Одним из наиболее интересных явлений в квантовой физике является запутанность [1-3]. В отличие от классических взаимодействующих подсистем, которые становятся независимыми друг от друга после отключения взаимодействия между ними, в квантово-запутанных подсистемах корреляции могут сохраняться даже после отключения взаимодействия. Поэтому, важным вопросом является анализ особенностей формирования и временной эволюции запутанных состояний после включения взаимодействия между подсистемами или после подключения одной из подсистем к резервуару. Одними из наиболее перспективных кандидатов для исследования запутанных состояний являются связанные квантовые точки, поскольку в таких системах могут быть легко инициализированы и считаны одно- и двухэлектронные состояния [4,5].

В докладе проанализирована временная эволюция первоначально приготовленного запутанного состояния в системе коррелированных связанных квантовых точек. Продемонстрировано, что для различных начальных смешанных состояний степень запутанности не только демонстрирует немонотонное поведение, но и может значительно возрастать. Полученные результаты открывают возможность для контролируемого переключения системы между запутанным и чистыми состояниями в процессе релаксации [6].

Кроме того, показано, что как спиновые корреляции, так и степень запутанности в системе двух коррелированных квантовых точек увеличиваются при включении взаимодействия с резервуаром. Этот эффект возникает потому, что динамика многоэлектронных состояний в системе коррелированных квантовых точек определяется свойствами симметрии всей системы, что приводит к коллективному поведению всех электронов [7].

Мы также предлагаем протокол для передачи в пространстве первоначально приготовленного запутанного состояния вдоль цепочек квантовых точек или квантовых проводов, расположенных в перпендикулярных направлениях [8].

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №18-72-10002.

1. G. Burkard, D. Loss, D.P. DiVincenzo, Phys. Rev. B, **59**, 2070 (1999).
2. G. Burkard, D. Loss, E.V. Sukhorukov, Phys. Rev. B, **61**, R16303 (2000).
3. C.A. Busser, F. Heidrich-Meisner, Phys. Rev. Lett., **111**, 246807 (2013).
4. D. Loss and D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
5. M. D. Schulman, O. E. Dial, S. P. Harvey, H. Bluhm, V. Umansky, A. Yakobi, Science **336**, 202 (2012).
6. N.S. Maslova, P.I. Arseyev, V.N. Mantsevich, Phys. Rev. A **96**, 042301 (2017).
7. N.S. Maslova, P.I. Arseyev, V.N. Mantsevich, Phys. Rev. E **97**, 022135 (2018).
8. N.S. Maslova, V.N. Mantsevich, P.I. Arseyev, Laser Phys. Lett. **19**, 055208 (2022).

Диэлектрическая проницаемость нанокомпозитов металл-диэлектрик

И.А. Некрасов
Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e–mail: nekrasov@iep.uran.ru

Для нанокомпозитов типа металл-диэлектрик (наночастицы 75 нм Al или Ti в диэлектрической матрице эпоксидной смолы) методом линии передачи получены комплексные коэффициенты отражения и пропускания S_{11} и S_{21} в диапазоне $8-12$ ГГц. На основе этих данных методом NRW вычислены комплексные диэлектрическая и магнитная проницаемости в данном диапазоне частот. Теоретически комплексные диэлектрическая и магнитная проницаемости были получены в рамках приближения эффективной среды. На основе обобщенного уравнения Бруггемана для эффективной диэлектрической проницаемости нанокомпозита показано, что с ростом объемной доли нанопорошка в композите геометрический характер агломератов наночастиц изменяется от нитевидных до практически сферических. Полученные теоретические данные хорошо согласуются с результатами СВЧ экспериментов и данными оптической и электронной микроскопии.

Данный доклад — это не просто представление окончательных результатов, а пошаговое описание процесса получения этих результатов. Таким образом, в докладе будет представлен алгоритм работы с «плохо поставленными задачами», умение решать которые всегда было конкурентным преимуществом людей, получивших и освоивших университетское физическое образование.

Работа поддержана проектом РФФИ-20-48-660044.

Кинетика параметрического усилителя бегущей волны: описание на основе диаграммной техники Швигера-Келдыша

С.В. Ремизов[1,2,3]*, А.А. Елистратов[1]

[1]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва, Россия
[2]Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
[3]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия
*e–mail: sremizov@gmail.com

Описание динамики открытых квантовых систем является сложной теоретической задачей, особенно для наиболее интересного случая, когда гамильтониан системы содержит слагаемые с тремя операторами и более. Наличие таких слагаемых представляет особую сложность при построении теории, в тоже время для ряда задач слагаемые такого типа играют ключевую роль. В настоящей работе рассмотрена именно такая ситуация.

Нами рассмотрена модель параметрического усилителя бегущей волны, который представляет из себя набор джозефсоновских переходов. Данная модель характеризуется эффективным одномерным бозонным гамильтонианом, состоящим из квадратичной части, соответствующей невзаимодействующим модам, и части, соответствующей взаимодействию между модами, которая, в свою очередь, в низшем порядке по нелинейности содержит слагаемые с четверками операторов. При этом предполагается, что к системе приложена сильная когерентная накачка и можно считать, что в начальном состоянии сильно заселена только одна мода, а заселенность остальных мод пренебрежимо мала. Нас будет интересовать режим квантовой генерации излучения, возникающий благодаря возможности распада пары фотонов из моды накачки в две другие моды (сигнальную и холостую). Мы рассмотрели медленную динамику такой системы, вызванную перекачкой энергии между модами благодаря неквадратичному характеру взаимодействующей части гамильтониана.

По аналогии с идеями работы [1], в которой для жидкости Латтинджера были выведены кинетические уравнения с учётом аномальных средних, мы применили методы теории поля в рамках келдышевского подхода, но уже для изучения медленной неравновесной динамики описанной выше системы. Используя уравнения Дайсона-Швингера в формализме Намбу, мы получили замкнутую систему динамических уравнений, описывающих кинетику нормальной и аномальной плотностей бозонных возбуждений в параметрическом усилителе бегущей волны в низшем порядке по нелинейности.

Наши результаты согласуются с результатами, полученными при анализе классических уравнений движения для амплитуд мод в аналогичной системе [2]. Мы также показали, что в рамках рассмотренной модели амплитуды мод могут либо осциллировать во времени, либо экспоненциально возрастать в зависимости от конкретных параметров. Кроме того было отдельно рассмотрено влияние каскадных процессов, соответствующих перекачке энергии между разными сигнальными и холостыми модами. Показано, что такие процессы могут приводить к подавлению генерации.

1. M. Buchhold and S. Diehl, Eur. Phys. J. D **69** 224 (2015).

2. O. Yaakobi *et al.*, Phys. Rev B **87**, 144301 (2013).

Термоупругие мартенситные превращения и эффекты памяти формы в сплавах

Н.Н. Реснина

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
e–mail: resnat@mail.ru

Термоупругие мартенситные превращения были открыты в конце 50-х годов 20 века академиком Г.В. Курдюмовым и проф. Л.Г. Хандросом в сплавах на основе меди. Было обнаружено, что при охлаждении кристаллы мартенсита появляются и растут в аустенитной матрице, а при нагревании — исчезают путем обратного движения межфазных границ. Установлено, что на границе мартенсит/аустенит сохраняется термоупругое равновесие между фазами, которое заключалось в том, что доля мартенситной фазы не меняется, если температура или напряжения остаются постоянными. Для изменения термоупругого равновесия необходимо изменить температуру или приложить внешнюю нагрузку. Позднее данный тип мартенситных превращений был обнаружен в сплавах на основе меди, железа, титана, никелида титана и сплавах Гейслера. Более того, было показано, что сплавы, испытывающие термоупругие мартенситные превращения, проявляют необычное механическое поведение — в них наблюдаются эффекты памяти формы.

Эффектом памяти формы называют способность сплава восстанавливать неупругую деформацию при нагревании. Важным свойством является псевдоупругость — способность восстанавливать большие неупругие деформации при разгрузке. Эффект обратимой памяти формы заключается в самопроизвольном обратимом изменении деформации при многократных теплосменах через температурный интервал превращений без нагрузки. Если нагревание сплава проводить в стесненных условиях (при постоянной деформации), то в образце генерируются реактивные напряжения, величина которых может достигать 800 МПа. Все эти эффекты определили широкое применение сплавов с памятью формы в различных отраслях техники и медицины от космических аппаратов до медицинских инструментов и костных имплантатов.

Несмотря на то, что термоупругие мартенситные превращения и эффекты памяти формы исследуют на протяжении уже более 50 лет, интерес к этим явлениям не ослабевает. Это связано как с тем, что в этих сплавах открывают новые явления, так и с тем, что развитие технологий ставит перед учеными новые вопросы относительно способов управления параметрами мартенситных превращений и эффектов памяти формы. В настоящее время наибольшее внимание приковано к изучению термоупругих мартенситных переходов и эффектов памяти формы в наноструктурированных сплавах, материалах, полученных аддитивными технологиями и в высокоэнтропийных сплавах. Особая структура данных материалов влияет на кинетику термоупругих мартенситных превращений, что позволяет получить дополнительные возможности для управления свойствами сплавов с памятью формы.

Структурная наследственность в металлургических расплавах

Р.Е. Рыльцев[1]*, Л.В. Камаева[2], Н.М. Щелкачев[3]

[1]Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
[3]Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина, Москва, Россия
*e–mail: rrylcev@mail.ru

Одна из базовых задач химии и наук о материалах – предсказание структуры и свойств твёрдых фаз при заданных термодинамических параметрах. В настоящий момент, данная задача может быть успешно решена лишь в некоторых относительно простых случаях, например, для предсказания структуры основного состояния кристаллов со сравнительно небольшим числом атомов в элементарной ячейке [1]. Однако для более сложных и практически важных случаев, таких как многокомпонентные (например, высокоэнтропийные сплавы) и многофазные системы, структурно неупорядоченные материалы (например, стекла) или в случае конечных температур, точное решение данной задачи найти практически невозможно. В последние годы интерес и потребность в изучении именно таких сложных систем неуклонно возрастает. В этой связи приобретают большую роль методы, позволяющие выявить тенденцию к образованию многокомпонентных сплавов с определенной структурой или оценить значение какого-либо наблюдаемого свойства в таких системах. Для решения данной задачи может быть использован комплексный экспериментально-теоретический подход, основанный на концепции структурной наследственности, связывающей высокотемпературные (неупорядоченные) и низкотемпературные (упорядоченные или частично упорядоченные) фазы. Под наследственностью в данном случае понимается наличие «генетической» взаимосвязи между структурой неупорядоченных и упорядоченных фаз. В последние годы наметился существенный прогресс в решении данной задачи, связанный с развитием методов машинного обучения для моделирования и предсказания свойств материалов. Машинное обучение позволяет с *ab initio* точностью моделировать структуру и свойства конденсированных систем [2], и кроме того, — эффективно изучать ближний порядок в неупорядоченных системах [3]. В докладе приводится изложение современного состояния проблемы изучения структурной наследственности в металлургических расплавах. Акцент будет сделан на рассмотрении структуры и свойств многокомпонентных металлических сплавов систем в жидком и твердом состояниях. Будут рассмотрены современные данные о химическом порядке и беспорядке химической неоднородности в металлических расплавах и методах их анализа, а также процессах кластеризации и нуклеации зародышеобразования при охлаждении расплавов. Особое внимание, будет уделено новейшим подходам для теоретического анализа структурной наследственности, основанные на применении алгоритмов машинного обучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-22-00506.

1. A.O. Lyakhov, A.R. Oganov, H.T. Stokes, Q. Zhu, Comput. Phys. Commun. **184**, 1172 (2013).
2. T. Wen, L. Zhang, H. Wang, E. Weinan, D. J. Srolovitz, Materials Futures **1**, 022601 (2022)
3. E. Boattini, S. Marín-Aguilar, S. Mitra, G. Foffi, F. Smallenburg, L. Filion, Nature communications **11**, 1 (2020).

Спин-орбитальное расщепление в двумерных системах

С.А. Тарасенко
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
e–mail: tarasenko@coherent.ioffe.ru

Спин-орбитальное взаимодействие в полупроводниковых структурах без центра пространственной инверсии приводит к нечетному по волновому вектору $\boldsymbol{k}$ спиновому расщеплению электронных и дырочных подзон даже в отсутствие магнитного поля. Наиболее известные вклады в такое расщепление — вклады Рашба и Дрессельхауза, обусловленные соответственно структурной асимметрией и отсутствием центра инверсии в объемном материале [1,2]. Спин-орбитальное расщепление спектра ответственно за множество эффектов, таких как спиновая релаксация по механизму Дьяконова-Переля, спин-гальванический эффект, ориентация спинов током, возникновение долгоживущих спиновых спиралей и т.д.

В докладе представлен краткий обзор физики нечетного по $\boldsymbol{k}$ спин-орбитального расщепления спектра двумерных систем на основе полупроводниковых квантовых ям и явлений, связанных с расщеплением. Обсуждаются теоретико-групповые методы построения эффективного гамильтониана спин-орбитального расщепления, а также $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ метод расчета констант спин-орбитального расщепления. Показано, что в квантовых ямах, выращенных вдоль низкосимметричных кристаллографических направлений, таких как [013], существует дополнительный тип расщепления, который не сводится к расщеплению Рашба и Дрессельхауза [3]. Более того, в широком диапазоне параметров этот вклад определяет линейное по $\boldsymbol{k}$ расщепление подзоны тяжелых дырок.

Обсуждается также вопрос о тонкой структуре двумерных дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe вблизи перехода топологический изолятор – тривиальный изолятор. Показано, что объемная, интерфейсная и структурная асимметрии приводят к антипересечению энергетических уровней даже при $\boldsymbol{k} = 0$ и снимают вырождение дираковских состояний [4]. В квантовых ямах критической толщины двукратно вырожденный дираковский конус расщепляется на невырожденные вейлевские конусы. Характер расщепления и положение вейлевских точек в пространстве волновых векторов и энергий зависят от кристаллографической ориентации ямы.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РНФ № 22-12-00211.

1. E.L. Ivchenko G.E. Pikus, Superlattices and Other Heterostructures. Symmetry and Optical Phenomena, (Springer-Verlag, Berlin, 1997).
2. R. Winkler, Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems, (Springer-Verlag, Berlin, 2003).
3. G.V. Budkin and S.A. Tarasenko, Phys. Rev. B **105**, L161301 (2022).
4. М.В. Дурнев, Г.В. Будкин, С.А. Тарасенко, ЖЭТФ **162**, 570 (2022).

Материалы с нецентросимметричными кристаллическими структурами на основе интеркалатов

А.Н. Титов[1,3*], А.С. Шкварин[1,2], А.И. Меренцов[1], М.С. Постников[1,2], Е.Г. Шкварина[1,2], А.А. Титов[1], Е.Г. Дьячков[3]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия
[3]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: antitov@mail.ru

В подавляющем большинстве интеркалатов соединений слоистых дихалькогенидов переходных металлов IV группы, изученных на текущий момент, внедрённые атомы занимают октаэдрическую позицию (окта-позицию) в геометрическом центре элементарной ячейки. Однако, нашей группой было обнаружено, что возможен синтез материалов с распределением интеркаланта по тетраэрически координированным халькогеном позициям (тетра-позициям). Такие позиции формируют две плоскости, смещённые относительно середины межслоевого пространства. Охлаждение приводит к упорядочению интеркаланта в одной из этих плоскостей. Таким образом, материалы с тетра-координацией интеркаланта формируют материалы с нецентросимметричной (НЦС) кристаллической структурой.

Установлено, что причиной изменения координации интеркаланта с окта- на тетра является снижение потенциала ионизации иона переходного металла соединения-хозяина. К настоящему времени нашей группой обнаружено три основных способа управления этой величиной: (1) Замещение переходного металла решётки-хозяина на металл с большим (или меньшим) потенциалом ионизации иона. (2) Со-интеркалация металлом, играющим роль донора. Это приводит к переносу заряда в зону проводимости, сформированную состояниями переходного металла решётки-хозяина и понижению потенциала ионизации его иона. Симметричный эффект с повышением потенциала ионизации пока не обнаружен. (3) Замещение по подрешётке халькогена, приводящее к формированию Янус-слоёв. Как оказалось, такие слои демонстрируют небольшой изгиб и, связанную с этим донорную способность. Поэтому так можно снизить потенциал ионизации. Симметричный эффект не обнаружен.

Обнаружено, что во многих случаях НЦС тетра-координацию приобретают атомы магнитных металлов, таких как Cr, Fe, Co, Ni. Обсуждаются возможности получения комбинации сегнетоэлектрического и магнитного упорядочений и взаимодействия между ними. Также обсуждается роль электронов проводимости в стабилизации/дестабилизации НЦС-структуры и поведение подсистемы свободных электронов в НЦС-структурах с магнитными атомами.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00361).

Исследование уравнений состояния тугоплавких материалов при высоких температурах

К.В. Хищенко

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия
Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия
Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия
e–mail: konst@ihed.ras.ru

Изучение термодинамических свойств различных материалов открывает возможности для построения физико-математических моделей разнообразных процессов интенсивного импульсного воздействия на конденсированное вещество [1]. Примерами таких процессов являются соударение тел с высокой кинетической энергией [2], взаимодействие мощного лазерного излучения короткой длительности [3] или потока высокоэнергетических частиц с веществом [4], электрический взрыв проводников при нагреве импульсом тока высокой плотности [5]. Для замыкания системы уравнений движения, которые выражают законы сохранения массы, импульса и энергии, требуется уравнение состояния вещества во всем диапазоне достигаемых термодинамических параметров. Последовательное построение уравнений состояния с опорой исключительно на представления статистической физики затруднено необходимостью учета взаимодействия между частицами в условиях сильной неидеальности [6]. В этой ситуации наличие данных высокотемпературных экспериментов позволяет проверять различные модельные предположения, а также служит основой для применения полуэмпирического подхода [1,6,7].

В настоящей работе проводится краткий обзор методов и результатов экспериментов по исследованию термодинамических свойств тугоплавких материалов в широком диапазоне температур и давлений. Даются примеры обобщения имеющейся экспериментальной и теоретической информации в форме полуэмпирического уравнения состояния для хрома, молибдена и других металлов при высоких плотностях энергии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 19-19-00713, https://rscf.ru/project/19-19-00713/.

1. A.V. Bushman, V.E. Fortov, G.I. Kanel', A.L. Ni, Intense Dynamic Loading of Condensed Matter. — Washington, DC: Taylor & Francis (1993).
2. K.V. Khishchenko, A.E. Mayer, Int. J. Mech. Sci. **189**, 105971 (2021).
3. В.А. Хохлов, В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, С.И. Ашитков, Д.С. Ситников, К.В. Хищенко, Ю.В. Петров, С.С. Манохин, И.В. Неласов, В.В. Шепелев, Ю.Р. Колобов, Письма в ЖЭТФ **115**, 576 (2022).
4. К.В. Хищенко, А.А. Чарахчьян, ЖВММФ **61**, 1715 (2021).
5. S.A. Barengolts, I.V. Uimanov, V.I. Oreshkin, K.V. Khishchenko, E.V. Oreshkin, Vacuum **204**, 111364 (2022).
6. А.В. Бушман, В.Е. Фортов, УФН **140**, 177 (1983).
7. K.V. Khishchenko, Energies **15**, 7067 (2022).

Структурное наследование и машинное обучение для дизайна новых материалов

Н.М. Щелкачев[1], Р.Е. Рыльцев[2,1]

[1]Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Россия
[2]Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: chtchelkatchev@hppi.troitsk.ru

Поиск взаимосвязей между элементным составом, структурой и макроскопическими характеристиками материалов является важнейшей задачей как для фундаментальных, так и для прикладных исследований. Большинство современных функциональных материалов на основе металлических сплавов — это многокомпонентные материалы. Большое количество степеней свободы делает чисто экспериментальный процесс поиска оптимальных составов сплавов крайне трудоемким и энергозатратным. Такой подход в значительной степени исчерпал свой ресурс и не отвечает современным требованиям. Поэтому крайне актуальной задачей является разработка новых подходов к дизайну материалов с использованием передовых открытий, новых установленных физических закономерностей, новейших методик исследования вещества. Одним из таких прогрессивных подходов является поиск новых материалов путем совместного использования реальных экспериментов и передовых методов многомасштабного первопринципного моделирования, основанных на использовании алгоритмов искусственного интеллекта. Систематическое развитие такого подхода и есть основная цель нашей работы.

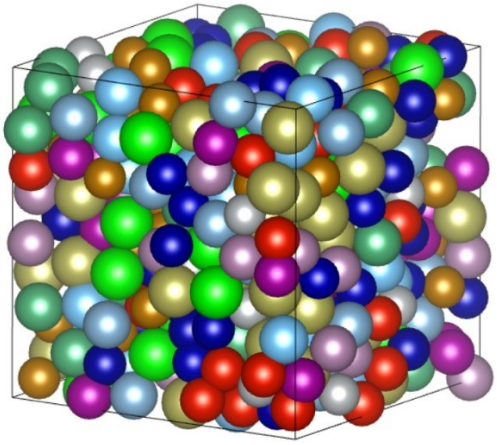


Рис. 1. Ячейка из 512 атомов.

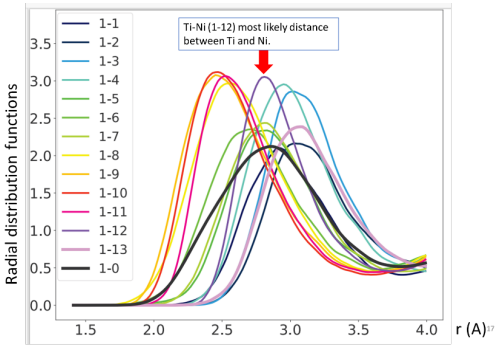


Рис. 2. Радиальные функции распределения расплава TiZrHfNbVCrMoMnFeCoNiAl.

Показано, что межчастичные потенциалы машинного обучения (MLIP — Machine Learning Interatomic Potentials) для многокомпонентных металлических сплавов, обученные только на неупорядоченных конфигурациях, см. рис. 1, могут точно описывать кристаллические структуры даже при низких температурах. Обучение MLIP на жидких конфигурациях достаточно простое: с помощью определенного алгоритма мы генерируем неупорядоченные конфигурации и находим энергию, межатомные силы и вириалы с помощью DFT, а также структурные характеристики расплавов, см. рис. 2. Неупорядоченные системы требуют довольно больших суперячеек (мы используем 512 частиц, см. рис. 1), которые включают ряд возможных локальных структурных конфигураций. Выбрав достаточно конфигурационного пространства, можно создать репрезентативный набор обучающих данных.

Работа сделана при поддержке Российского научного фонда №18-12-00438.

1. R.E. Ryltsev, N.M. Chtchelkatchev, J. Mol. Liq. **349**, 118181 (2022).

Релятивистские СВЧ-генераторы с потоками излучения высокой мощности в зоне взаимодействия и в свободном пространстве

М.И. Яландин
Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e–mail: yalandin@iep.uran.ru

Представлены физические основы и состояние исследований в области нано- и пикосекундной электроники больших мощностей [1], направленных на получение коротких сильноточных пучков электронов, импульсов электромагнитного излучения с уникальными характеристиками и их применение в фундаментальных и прикладных задачах. С открытием в 1970-х взрывной электронной эмиссии (ЕЕЕ) связана предыстория создания компактных импульсно-периодических высоковольтных генераторов РАДАН. Эти приборы, укомплектованные электронными и рентгеновскими трубками, применялись для систем дефектоскопии, стерилизации, накачки лазерных сред, при изучении реакции биологических объектов, катодолюминесценции диэлектриков, и других эффектов радиационного воздействия [2]. Самостоятельным направлением работ являлось формирование сильноточных электронных пучков в коаксиальных вакуумных диодах с магнитной изоляцией. Такие пучки с длительностью в единицы наносекунд и короче были необходимы для исследований по генерации мощного когерентного излучения в диапазоне миллиметровых волн при черенковском и других механизмах электронно-волнового взаимодействия, в том числе, — в режиме сверхизлучения (СИ). Работы по направлениям [1,2] стимулировали применение в исследованиях новых разновидностей драйверов электронных инжекторов, основанных на полностью твердотельных системах формирования, коммутации и обострения ускоряющих импульсов [3,4].

Отмеченная в [1-4] техника эксперимента, методы и подходы позволили получить ряд приоритетных результатов. (i) Выяснено, что субнаносекундные импульсы СИ с мощностью до 3 ГВт могут формироваться в замедляющих структурах (ЗС) черенковских генераторов обратной волны при напряженностях полей на стенках ЗС в единицы МВ/см и выводиться в пространство на стадии задержки пробоев. (ii) Стабильность фронта электронного пучка большой крутизны относительно ускоряющего импульса определяет воспроизводимость фазы СИ от включения к включению. (iii) За счёт синхронизации фаз возможно когерентное суммирование излучения нескольких генераторов (в том числе, субгигаватных), достижение экстремальных потоков мощности интегрального волнового пучка и управление его направленностью [5]. (iv) Фаза СИ (в том числе, фазы нескольких таких субгигаваттных генераторов) могут задаваться внешним затравочным сигналом [6]. Это представляет интерес для фазировки питания резонаторов в системах высокоградиентного ускорения электронных сгустков. (v)* Расчёты методом крупных частиц показали, что в поле резонатора типа «pill-box», накачанного импульсом СИ, параксиальный электронный пучок может быть ускорен при градиенте до 400 МВ/м [7]. В экспериментах получен градиент 250 МВ/м при ускорении сгустка от 250 кэВ до 1.25 МэВ.

В части задач*) работа поддержана проектом РНФ № 21-19-00260.

1. Г.А. Месяц, М.И. Яландин, УФН **175**, 225 (2005).
2. G.A. Mesyats, et al., Proc. IEEE **92**, 1166 (2004).
3. S.N. Rukin, Rev. Sci. Instr. **91**, 011501 (2020);
4. I.V. Romanchenko, Rev. Sci. Instr. **83**, 074705 (2012).
5. N.S. Ginzburg, et al., Phys. Rev. Lett. **115**, 114802 (2015).
6. G.A. Mesyats, et al., Phys. Rev. Lett. **118**, 264801 (2017).
7. V.G. Shpak, S.A. Shunailov, M.I. Yalandin, J. Phys. Conf. Ser. **2064**, 012002 (2021).

Плазмоника для систем терагерцовой электроники

В.М. Муравьев*, И.В. Кукушкин

Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия
*e–mail: muravev_vm@mail.ru

Терагерцовый (ТГц) диапазон (0.1 — 3 ТГц) является наиболее технологически слабо освоенным частотным диапазоном в спектре электромагнитных волн. Это обуславливает перспективность научных разработок в области ТГц электроники. Большинство полупроводниковых материалов, используемых в современной электронике, демонстрируют сильное изменение своих физических свойств на ТГц частотах. Отклик материала начинает определяться реактивной плазмонной составляющей импеданса. В докладе описываются последние достижения мировой науки по исследованию плазменных возбуждений в полупроводниковых наноструктурах. Приводятся примеры применения плазмоники для построения элементов терагерцовой электроники.

В большинстве твердотельных полупроводниковых систем двумерный слой контактирует с множеством электродов (контакты, затворы). До недавнего времени считалось, что электроды вносят незначительное возмущение в свойства плазменных волн в $2D$-системах. Недавно было экспериментально и теоретически установлено, что данное предположение имеет целый ряд ограничений. Как следствие, был открыт ряд новых двумерных плазменных возбуждений — релятивистские плазмоны [1], «проксимити» плазмоны (proximity plasmons) [2,3], «сверхсветовые» электромагнитные плазмоны [4]. Экспериментальное исследование этих разновидностей плазменных волн привело к разработке целого ряда новых систем терагерцовой электроники.

Естественным стимулом работ в области $2D$-плазмоники являются многочисленные приложения результатов этих исследований в области терагерцовой электроники. Среди них следует выделить два направления. С одной стороны, практическое применение плазменных волн обусловлено значительно более высокими скоростями плазменных возбуждений по сравнению с дрейфовой скоростью электронов. Это может потенциально повысить быстродействие полупроводниковых устройств до частоты 10 ТГц. Вторым направлением применения $2D$-плазмоники является гигантское усиление оптического отклика плазмон-поляритонными волнами. Идея подхода состоит в том, чтобы преобразовать падающую электромагнитную волну в распространяющуюся вдоль поверхности кристалла плазмон-поляритонную волну. Таким образом электромагнитное поле локализуется вблизи поверхности на масштабах порядка длины волны плазмона. Из-за сильной локализации поля, вблизи поверхности наблюдается сильное усиления локального электромагнитного поля, что может применяться для создания высокочувствительных детекторов терагерцового излучения.

1. V.M. Muravev *et al.*, Phys. Phys. Lett. **114**, 106805 (2015).

2. A.A. Zabolotnykh, V.A. Volkov, Phys. Phys. B **99**, 165304 (2019).

3. V.M. Muravev *et al.*, Phys. Phys. B **99**, 241406 (2019).

4. A. Shuvaev, V.M. Muravev *et al.*, Phys. Phys. Lett. **126**, 136801 (2021).

Магнитные явления

Влияние частичного замещения Fe на Mn на магнитные и магнитокалорические свойства сплава $LaFe_{11.2}Co_{0.7}Si_{1.1}$

Н.З. Абдулкадирова[1]*, А.Г. Гамзатов[1], К.И. Камилов[1,2], А.М. Алиев[1], P. Gebara[3]

[1]Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
[2]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
[3]Czestochowa University of Technolog, Czestochowa, Poland
*e–mail: nnurizhat@mail.ru

С точки зрения использования материалов в технологии магнитного охлаждения больший интерес представляют материалы с фазовыми переходами (ФП) второго рода. Прекрасным примером таких материалов являются соединения на основе системы La-Fe-Co-Si с фазовым переходом второго рода [1], хотя исходные композиции La-Fe-Si демонстрируют ФП первого рода [2].

В сплавах La-Fe-Si большие значения изменения магнитной энтропии является следствием гигантских магнитообъемных эффектов (где изменение объема решетки может достигать $\sim 1\%$). Одним из первых на это обратили внимание авторы работы [2], где было показано, что большое отрицательное расширение решетки является основной причиной гигантских значений МКЭ. Однако наличие гигантских магнитообъемных эффектов делает эксперименты по магнитострикции в импульсных магнитных полях очень сложными, так как образец склонен к образованию трещин (а иногда образец и вовсе разрушается) даже после первоначального намагничивания. Это можно объяснить не только самим изменением объема, но и высокой скоростью развертки поля в источниках импульсных магнитных полей, что увеличивает механическое напряжение в образце.

В рамках данной работы проведены исследования намагниченности, магнитострикции и магнитокалорического эффекта сплавов $LaFe_{11.1-x}Mn_xCo_{0.7}Si_{1.1}$ ($x = 0.1, 0.2, 0.3$) в интервале температур $80 - 300$ К и в импульсных магнитных полях до 180 кЭ. Частичное замещение Fe на Mn приводит к небольшому уменьшению T_C ($T_C = 247, 222, 202$ К соответственно для $x = 0.1, 0.2, 0.3$). Для оценки магнитокалорических свойств применены прямые и косвенные методы. Измерения магнитострикции выполнялись в продольной конфигурации, т. е. с полем параллельным изменению длины ($\Delta l/l$).

Зависимость ΔS_M от магнитного поля вблизи T_C для всех образцов описывается степенным законом $S_M \sim H^{2/3}$ без признаков насыщения вплоть до 180 кЭ, что характерно для фазовых переходов второго рода. Максимальные значения ΔS_M для сплавов $LaFe_{11.1-x}Mn_xCo_{0.7}Si_{1.1}$ в поле 180 кЭ равны 38, 30 и 32 Дж/(кг·К) соответственно для $x = 0.1, 0.2, 0.3$). Т.е. частичное замещение Fe на Mn позволяет контролировать T_C при этом величина МКЭ меняется незначительно. Результаты исследования магнитострикции показывают, что для всех образцов полевые зависимости магнитострикции стремятся к насыщению при $H \geqslant 120$ кЭ. Дальнейший рост магнитного поля от 120 кЭ до 180 кЭ приводит к росту магнитострикции примерно на $\sim 6\%$. Такое поведение является следствием того, что в сильных магнитных полях для сплавов $LaFe_{11.1-x}Mn_xCo_{0.7}Si_{1.1}$ ($x = 0.1, 0.2, 0.3$) с фазовым переходом близким к переходу второго рода, магнитный вклад в МКЭ доминирует над решёточным вкладом [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ № 21-58-53046.

1. P. Gębara, P. Pawlik, J. Magn. Magn. Mat. **442**, 145 (2017).

2. F.X. Hu,*et al*, Appl. Phys. Lett. **78**, 3675 (2001).

3. N.Z. Abdulkadirova, *et al*, Journal of Alloys and Compounds **929**, 167348 (2022).

Структура, диэлектрические свойства и рамановская спектроскопия наночастиц шпинели Zn – Cd

А.С. Абухасва[1,2*], М.Х. Бадр[1], М.А. Хассан[1], М. Мустафа[1], Ю.С. Раммах[1], А.А. Эль-Хамалави[1]

[1]Университет Менуфия, Шибин-Эль-Ком, Египет
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: aliabohaswa@hotmail.com

Образцы наночастиц феррита-шпинели $Cd_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ были синтезированы методом мгновенного автовозгорания. Для изучения кристаллической структуры приготовленных образцов использовали рентгеновскую дифракцию, спектроскопию комбинационного рассеяния, растровую электронную микроскопию (РЭМ) и инфракрасную спектроскопию с Фурье-преобразованием. Диэлектрические и магнитные свойства полученных ферритов были измерены с использованием широкополосной диэлектрической спектроскопии и вибрационного магнитометра, соответственно. Рентгенофазовый анализ подтвердил образование ферритов-шпинелей с увеличением постоянной решетки и размеров частиц за счет увеличения содержания Cd. Измерения РЭМ показали, что образцы ферритов из чистого $ZnFe_2O_4$ и легированного Cd имеют сферическую форму и однородное распределение по размерам. Измеренные содержания элементов Zn^{2+}, Cd^{2+} и Fe^{3+} находятся в желаемых стехиометрических пропорциях, согласно данным энергодисперсионного рентгеновского анализа. При помощи рамановской спектроскопии было подтверждено наличие характерных октаэдрических и тетраэдрических колебаний решетки и их зависимость от содержания Cd. Магнитные измерения показывают уменьшение намагниченности насыщения и увеличение коэрцитивной силы с увеличением содержания Cd. Исследования диэлектрических свойств показали, что замена Cd на Zn обычно приводит к значительному увеличению диэлектрической проницаемости и электропроводности, особенно на более низких частотах. Изменение электрических свойств в зависимости от содержания Zn было объяснено изменением размера зерна и электронным обменом между ионами Fe^{2+} и Fe^{3+}. Была изучена частотная зависимость реальной части комплексной проводимости и исследовано ее изменение во времени перескока на более низких частотах, что согласуется с теоретическими работами.

Влияние термообработки на структурные параметры тонких пленок NiO

М.С. Артемьев*, В.В. Изюров, К.А. Меренцова, И.А. Десятников, С.С. Дубинин, А.П. Носов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: cccp9697@mail.ru

Оксид никеля NiO представляет собой легкоплоскостной антиферромагнетик второго типа ($S = 1$) с температурой Нееля $T_N = 523$ К. NiO имеет кристаллическую структуру типа NaCl (пространственная группа $Fm-3m$) с параметром элементарной ячейки $a = 0.4182$ нм [1]. В большинстве работ исследовали физические свойств объемных образцов (моно- и поликристаллов). Тонкие пленки оксида никеля представляет большой интерес для современной антиферромагнитной спинтроники [2]. В работе рассматривалась зависимость изменения кристаллографических параметров тонких пленок NiO от температуры послеростовой термообработки.

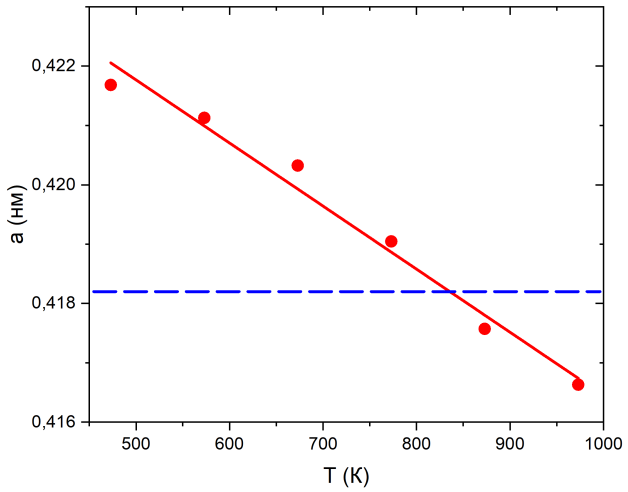


Рис. 1. Зависимость тонких пленок NiO от температуры термообработки. Пунктир — величина a для монокристалла [1].

Пленки NiO толщиной 700 нм получали методом магнетронного распыления стехиометрический мишени на переменном токе в атмосфере 90%Ar + 10%O_2. В процессе распыления температура подложки из Al_2O_3 составляла 473 К. После распыления пленки термообрабатывали на воздухе в диапазоне температур 573 – 973 К в течении 3 часов. Рентгеноструктурные исследования проводили с использованием дифрактометра `PANalytical Empyrean`. Измеряли спектры рентгеновской дифракции в копланарной геометрии. Значения параметров решетки при каждой температуре были рассчитаны методом Нельсона-Рейли [3].

Полученная зависимость параметра решетки от температуры термообработки тонких пленок NiO представлена на Рис.1. Пунктирная линия соответствует значению для монокристалла [1]. С ростом температуры термообработки значения a систематически уменьшаются. Эти изменения могут быть аппроксимированы линейной зависимостью $a(T) = A - B \cdot T$ с $A = 0.42708$ нм и $B = 5.7 \cdot 10^{-4}$ нм/К. Такие изменения могут быть связаны с изменением стехиометрии образцов по кислородной подрешетке, что требует дальнейшего независимого подтверждения.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», номер госрегистрации 122021000035–6).

1. M.I. Aivazov *et al.*, Inorganic Materials **7**, 1389 (1971).
2. V. Baltz *et al.*, Rev. Mod. Phys. **90**, 012002 (2018).
3. J.B. Nelson, D.P. Riley Proc. Phys. Soc. **57**, 160 (1945).

Визуализация векторного поля системы магнитов по магнитооптическим изображениям

Л.Г. Богуславский*, В.Е. Иванов, А.А. Фещенко, С.В. Андреев, В.Н. Лепаловский

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: lev.bog12@gmail.com

Визуализация магнитооптических изображений плоскостной компоненты намагниченности доменных и микромагнитных структур позволяет построить распределения направлений этой намагниченности [1]. Эти результаты могут быть использованы для визуализации направлений плоскостной компоненты поля, создаваемого различными магнитными системами. Такая возможность подтверждается выявлением деталей распределения плоскостной компоненты поля вблизи поверхности постоянных магнитов [2]. В частности, наличие особых точек плоскостной компоненты может способствовать пониманию глобальной структуры магнитного поля.

В нашей работе стояла задача визуализации сложных распределений плоскостной компоненты полей, создаваемых системами магнитов с различной ориентацией магнитных моментов. Магнитооптические изображения неоднородных полей регистрировались при помощи микроскопа Evico Magnetics в поперечной (рис. 1a) и продольной (рис. 1b) чувствительности с использованием индикаторных аморфных пленок с составом $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$. Эти два изображения в программе Mathcad были преобразованы в векторный график неоднородного поля (рис. 1c). Усложнение конфигурации поля производилось приложением внешнего однородного поля. Полученные графики сравнивались с рассчитанными пространственными конфигурациями магнитных полей. Особое внимание было уделено деталям распределения магнитного поля вблизи особых точек.

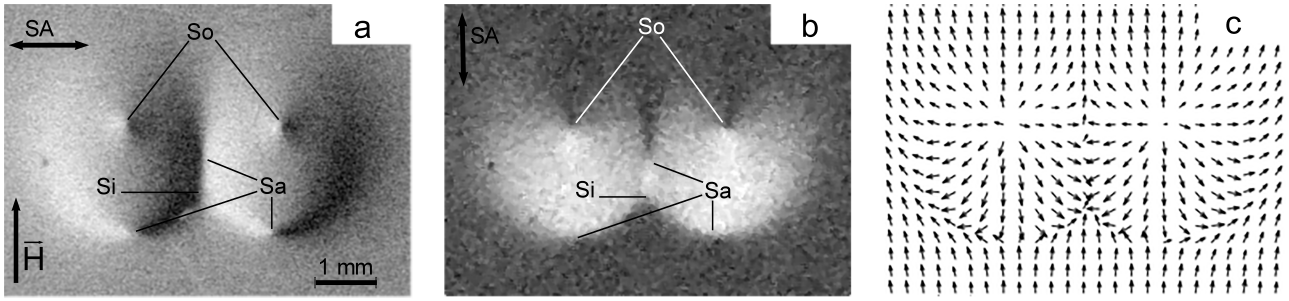


Рис. 1. Магнитооптические изображения в поперечной — (a) и продольной — (b) чувствительности, (c) — векторный график плоскостной компоненты магнитного поля, реконструированный из изображений (a) и (b). **H** — направление магнитного поля, SA(Sensitivity Axis) — ось магнитооптической чувствительности к ориентации намагниченности индикаторной пленки. Особые точки: So(Source) — особая точка типа «исток»; Si(Sink) — особая точка типа «сток»; Sa(Saddle) — особая точка «седловидного» типа.

1. T. von Hofe *et al.*, Appl. Phys. Letters **103**, 142410 (2013).

2. V.E. Ivanov, A.V. Koveshnikov, J. Magn. Magn. Mater. **460**, 153 (2018).

Особенности гистерезисных свойств и магнитной анизотропии тонких плёнок Ni

А.А. Быкова[1]*, А.Н. Горьковенко[1], Н.А. Кулеш[1], В.О. Васьковский[1,2]
[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: nastyabykowa@gmail.com

Изучение тонких магнитных пленок, в составе которых есть слои Ni, на сегодняшний день является актуальной задачей в исследовательском мире. Столь особенное внимание к данной теме обусловлено наличием отрицательной магнитострикции в упоминаемом материале, оказывающей специфическое влияние на магнитную анизотропию объектов [1,2]. Исследование этой связи является важным с точки зрения как фундаментальных, так и прикладных задач. Данная работа посвящена изучению анизотропии гистерезисных свойств тонких поликристаллических плёнок Ni, а также возможности её модификации путём ведения дополнительных металлических покрытий и термомагнитной обработки.

Исследовались образцы трёх типов: glass/Ni, glass/Ni/Ta, glass/Ta/Ni/Ta, где glass — стеклянные подложки Corning, Ta — дополнительные танталовые покрытия толщиной 5 нм. Они были получены методом магнетронного распыления на установке Orion 8. Формирование металлических осадков происходило в присутствии однородного магнитного поля (технологическое поле) напряжённостью 250 Э, которое было ориентировано параллельно плоскости образцов. Толщина слоёв Ni во всех образцах составляла 40 нм. Термомагнитная обработка состояла в накапливающемся отжиге плёнок в магнитном поле напряжённостью 250 Э при последовательном увеличении температуры в интервале 200 – 400°C и выдержке при каждой температуре в течение 1 часа.

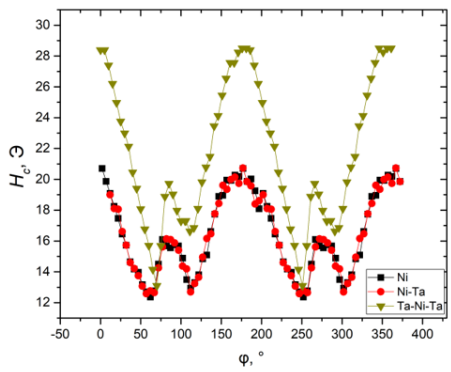


Рис. 1. Угловые зависимости H_c образцов разного типа в исходном состоянии.

Структурная аттестация образцов выполнена на дифрактометре Bruker D8 ADVANCE. Она показала наличие в слоях никеля в исходном состоянии сильной кристаллической текстуры с преимущественной ориентацией плоскостей типа (111) ГЦК-решётки параллельно плоскости плёнок, которая в большой мере сохраняется и после термообработки. Для аттестации магнитных свойств плёнок использовался вибромагнитометр Lakeshore 7407, на котором измерялись петли гистерезиса в магнитном поле, ориентированном в плоскости плёнок под различными углами ϕ по отношению к направлению приложения технологического поля.

На рис. 1 в качестве примера приведены угловые зависимости коэрцитивной силы H_c образцов разного типа в исходном состоянии. Как видно, все они немонотонны, что отражает наличие сложной магнитной анизотропии в плоскости плёнок, уровень которой усиливается при наличии металлического буферного покрытия. Термическое воздействие, напротив, ослабляет анизотропию вплоть до её полного исчезновения после отжига при 400°C. На основе предположения о суперпозиции магнитостатического и магнитоупругого механизмов магнитной анизотропии выполнен анализ полученных закономерностей.

Работа выполнена по теме № FEUZ-2020–0051.

1. K. Ha, R. C. O'Handley, Journal of applied physics **85**, 5282 (1999).
2. S. M. Chérif *et al.*, Physica B: Condensed Matter **387**, 281 (2007).

Электрические и магнитные свойства α″ − $(Cd_{1-x}Mn_x)_3As_2$ и 20 мол.% MnAs ($x = 0.08$)

Л.А. Сайпулаева[1]*, А.М. Алиев[1], М.М. Гаджиалиев[1], А.М. Гаджиев[1,2], А.И. Риль[3], С.Ф. Маренкин[3]

[1]Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
[2]Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия
[3]Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия
*e–mail: l.saypulaeva@gmail.com

Исследована намагниченность, сопротивление и магнитосопротивление α″ − $(Cd_{1-x}Mn_x)_3As_2$ и 20 мол. % MnAs ($x = 0.08$) в диапазоне температур 4 − 300 К и магнитных полях 0−8 Тл. С ростом температуры наблюдается резкое уменьшение магнитной восприимчивости, температура Кюри T_C, оцененная по точке перегиба кривой $\chi(T)$ (где $\partial^2\chi)/\partial T^2 = 0$) при $H = 100$ Э, составляет 325 К. На рис. 1 представлены температурные зависимости электросопротивления α″ − $(Cd_{1-x}Mn_x)_3As_2$ и 20 мол.% MnAs ($x = 0.08$) в интервалах температур 4−300 К и магнитных полей 0−8 Тл, при взаимноперпендикулярном направлении электрических и магнитных полей. С ростом температуры и величины магнитного поля наблюдается увеличение сопротивления.

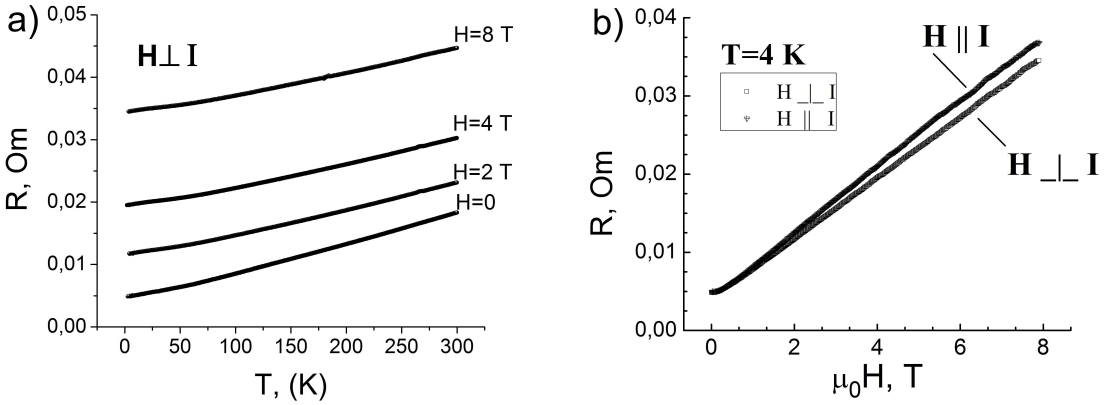


Рис. 1. a) Температурные зависимости сопротивления композита α″−$(Cd_{1-x}Mn_x)_3As_2$ и 20 мол.% MnAs ($x = 0.08$) в магнитных полях: 1) 0 Тл; 2) 2 Тл; 3) 4 Тл; 4) 8 Тл; b) Магнитополевые зависимости сопротивления при $T = 4$ К.

Видно, что композит проявляет металлический ход проводимости и положительный характер магнитосопротивления. На рис.1b представлены магнитополевые зависимости сопротивления при 4 К в двух направлениях, когда вектора магнитного поля электрического поля взаимноперпендикулярны и параллельны. Различие от направления полей указывают на наличие анизотропного магниторезистивного эффекта, характерного для ферромагнетиков. Эффект подавляется воздействием силы Лоренца, приводящей к появлению положительного магнитосопротивления, что подтверждают магнитополевые зависимости, измеренные в диапазоне магнитных полей 0 ÷ 8 Тл и температур 4 − 300 К, при перпендикулярной направленности векторов магнитного и электрических полей (рис.1a). Так как в композите наблюдается линейный характер изменения сопротивления от температуры (рис.1a) и от магнитного поля (рис.1b), что отличает композит от фазы Cd_3As_2 (без включений MnAs). Для которой также наблюдается колоссальный магниторезистивный эффект, однако отсутствует линейный характер зависимости сопротивления от температуры и магнитного поля. Таким образом, композиты системы Cd_3As_2 − MnAs могут представлять практический интерес в качестве материалов сенсоров температуры и магнитных полей.

Температурно-частотные зависимости магнитокалорического эффекта вблизи T_C в сплавах $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{22-x}(Cu,Zn)_x$

А.Г. Гамзатов*, А.М. Алиев

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

*e–mail: gamzatov_adler@mail.ru

Магнитное охлаждение на основе магнитокалорического эффекта (МКЭ) представляет собой перспективную энергоэффективную и экологически чистую альтернативу традиционному охлаждению. Созданные к настоящему времени прототипы магнитных холодильных машин работают на относительно низких частотах (4-10 Гц), поэтому актуально исследование МКЭ в зависимости от частоты циклического магнитного поля. Одним из ярких представителей магнитокалорических материалов являются сплавы Гейслера, в которых наблюдаются магнитные и магнитоструктурные фазовые переходы.

В работе представлены результаты прямого измерения МКЭ в сплавах $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{22-x}(Cu, Zn)_x$ ($x = 0; 1.5$) в циклических магнитных полях 0.62 и 1.2 Тл с частотой до 20 Гц. Замещение атомов Ga атомами Zn и Cu вызывает значительное повышение температуры структурных превращений и снижение T_C, что приводит к сближению температур фазовых переходов [1]. Такое сближение температур мартенситно-аустенитного фазового перехода и ферромагнитного перехода приводит к сосуществованию АФМ-ФМ фаз, что подтверждается данными рентгеноструктурного анализа [1].

Результаты исследования влияние частоты циклического магнитнгого поля 0.62 Тл на величину адиабатического изменения температры показывают, что максимальная величина ΔT наблюдается для исходного образца $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{22}$ и равна 0.43 К при $f = 0.5$ Гц. С ростом частоты циклического поля наблюдается монотонное уменьшение величины ΔT, и при $f =$ 19 Гц $\Delta T = 0.32$ К, т.е. эффект уменьшается на 25%. Легирование исходного соства цинком и медью приводит к уменьшению величины ΔT до 0.32 и 0.31 К при $f = 0.5$ Гц соответсвенно для $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{20.5}Zn_{1.5}$ и $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{20.5}Cu_{1.5}$. Для обеих композиций наблюдается примерно схожая чатотная зависимость ΔT_{max} и при чатотах 19 Гц величина МКЭ уменьшается примерно в 8 раз. Относительная слабая частотная зависимость, наблюдаемая в исходном составе, является следствием неоднородной микроструктуры образца. Ранее на примере манганитов было показано [2], что уменьшение размера гранул или плохие межзеренные контакты приводят, как к уменьшению величины МКЭ, так и более сильной частотной зависмости $\Delta T(T, f)$. То есть границы гранул выступают дополнительным каналом тепловой диссипации в динамических процессах намагничивания/размагничивания. Так как исходный состав $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{22}$ однофазный, то наблюдаемую вблизи T_C частотную зависимость мы связываем с неоднородной микроструктурой образца. Причину относительно сильной частотной зависимости $\Delta T(T, f)$ для составов с Cu и Zn мы связываем с сосуществованием фаз мартенсит-аустенит. Сосуществование фаз в системе означает, что между двумя фазами будут области, в которых структура системы будет варьироваться от одной фазы к другой, известная как стенка фазовой границы. В области сосуществования фаз объем отдельных фаз и границы разделения фаз зависят от магнитного поля и температуры. Следовательно, в динамических процессах намагничивания/размагничивания разные фазы будут иметь разный отклик (часто демонстрирующий противоположные знаки для АФМ и ФМ фаз) на магнитное поле, и реакция становится пропорциональной объему фазы.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-19-00610.

1. A.G. Gamzatov, A.B. Batdalov *et al.*, Intermetallics **143**, 107491 (2022).

2. A.M. Aliev, A.G. Gamzatov, JMMM **553**, 169300 (2022).

Форма микрообъекта как управляющий фактор при изменении оси однонаправленной магнитной анизотропии в спиновых клапанах

А.А. Гермизина[1,2]*, Л.И. Наумова[1,2], М.А. Миляев[1,2], А.Ю. Павлова[1], И.К. Максимова[1], В.В. Проглядо[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: an.germizina@yandex.ru

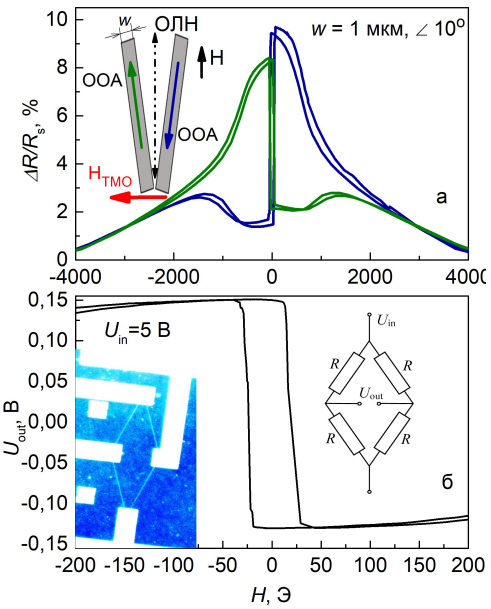


Рис. 1. а — полевые зависимости магнитосопротивления двух полосок, шириной $w = 1$ мкм, полученные после ТМО; б — зависимость напряжения U_{out} от магнитного поля, приложенного вдоль большой диагонали ромба, вставка слева — фотография микрообъекта в виде ромба с контактными дорожками

Многослойные наноструктуры типа спиновый клапан (СК) обладают гигантским магниторезистивным эффектом. В СК два ферромагнитных (ФМ) слоя разделены прослойкой меди. Один из ФМ слоев (закрепленный) связан обменным взаимодействием с прилегающим к нему слоем антиферромагнетика (АФМ). В результате возникает однонаправленная магнитная анизотропия с осью однонаправленной анизотропии (ООА). Петля гистерезиса перемагничивания закрепленного слоя сдвигается от $H = 0$ в область больших полей. Второй ФМ слой называется свободным и перемагничивается в полях близких к $H = 0$. При напылении СК в магнитном поле в нем формируется одноосная магнитная анизотропия с осью легкого намагничивания (ОЛН), после напыления ОЛН||ООА. В микрообъектах большое значение приобретает анизотропия формы [1]. В работе исследуется влияние анизотропии формы на изменение направления ООА в микрообъектах на основе СК при термомагнитной обработке (ТМО).

Спиновые клапаны Ta/NiFeCr/CoFeNi/Cu/CoFeNi/Ru/CoFeNi/FeMn/Ta изготовлены методом магнетронного напыления. Микрополоски, отклоненные от ОЛН в противоположные стороны на одинаковый угол (вставка на рис. 1а) и микроструктуры в виде ромба, большая диагональ которого совпадает с ОЛН (рис. 1б), изготавливали методом лазерной литографии. Микроструктуры в виде ромба были предназначены для сенсора с элементами, объединенными в соответствии со схемой моста Уитстона (вставка справа на рис. 1б). Найден способ ТМО при котором одинаковый режим изменения магнитного поля и температуры приводит к формированию взаимно противоположных ООА в двух образующих угол микрополосках, (рис. 1а), и попарно противоположных ООА в плечах моста Уитстона. В результате микрообъект работает как полный мост Уитстона (рис 1.б), а именно, $U_{\text{out}}/U_{\text{in}} = \Delta R/R$, где ΔR — изменение сопротивления элемента при изменении магнитного поля.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ (тема “Спин”122021000036-3).

1. R. S. Zavornitsyn, *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. **1389**, 012157 (2019).

Анизотропия магнитокалорического эффекта в монокристалле MnAs

В.В. Говорина[1]*, А.А. Амиров[2], Л.А. Сташкова[3], Д.С. Незнахин[1]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
[3]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: valeria.govorina@urfu.me

Явление изменения температуры магнитного вещества при адиабатном изменении величины внешнего поля называется магнитокалорическим эффектом (МКЭ). Магнитокалорический эффект количественно характеризуется двумя основными параметрами — изотермическим изменением магнитной энтропии ΔS_M или адиабатическим изменением температуры ΔT_{ad} при изменении напряженности магнитного поля, действующего на образец. В соединениях, претерпевающих магнитный фазовый переход 1 рода, МКЭ наиболее выражен. Одним из таких соединений является арсенид марганца, в котором при температуре 313 К происходит переход из ферромагнитного состояния в парамагнитное [1]. В работе [2] представлен пример расчёта ΔS_M в поликристаллическом образце MnAs. Наиболее важные для учёта при расчёте магнитокалорического эффекта факторы выделены в работе [3]. Среди них необходимость учитывать ориентацию кристаллографических осей, действие размагничивающего поля, приоритетность использования для расчёта ΔS_M изополевых зависимостей, аккуратный подбор шага по температуре, а также учёт магнитной предыстории. Отсюда следует, что результаты расчетов величины изотермического изменения магнитной энтропии, полученные без соблюдения всех этих нюансов, могут отличаться от реальной величины ΔS_M, а также иметь различия при измерении вдоль разных кристаллографических направлений.

В данной работе на монокристаллическом образце MnAs проведены изотермические и изополевые магнитные измерения вдоль разных кристаллографических осей. Для сравнения изотермические измерения проводились как с магнитной предысторией, так и без неё. Вычисления изотермического изменения магнитной энтропии проведены как с учётом размагничивающего поля внутри образца, так и без него. Установлено, что в исследованном соединении MnAs имеет место анизотропия МКЭ, при этом оценка ΔS_M зависит от использованных методик. Учёт всех методических особенностей в определении величины изотермического изменения магнитной энтропии показал, что в области фазового перехода значения ΔS_M для монокристалла меньше, чем ΔS_M поликристаллического образца.

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

2. A. M. G. Carvalho *et al.*, J. Alloys and Compounds **509**, 3452 (2001).

3. H. Neves Bez *et al.*, J. of Magnetism and Magnetic Materials **458**, 301 (2018).

Влияние инфильтрации легкоплавких добавок на гистерезисные магнитные свойства сплава MQP-B

А.А. Голубятникова*, А.Н. Шалагинов, В.Е. Мальцева, С.В. Андреев, А.С. Волегов

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: a.a.golubiatnikova@urfu.me

В различных технических устройствах мы неизбежно сталкиваемся с нагревом постоянных магнитов. Так при нагреве неодимовых магнитов до 100 °C наблюдается значительное снижение значения коэрцитивной силы. Одним из способов ее увеличения является процесс зернограничной инфильтрации легкоплавких добавок в материал, из которого изготовлен постоянный магнит. Суть процесса заключается в просачивании расплава между кристаллитами основного магнитотвердого сплава с образованием парамагнитной прослойки.

В настоящей работе исследовано влияние инфильтрации разных легкоплавких добавок на магнитные гистерезисные свойства магнитотвердого сплава на основе соединения $Nd_2Fe_{14}B$. Методом дуговой плавки получены легкоплавкие эвтектические добавки следующего состава: $Nd_{75}Cu_{25}$, $Nd_{75}(Co_{0.75}Cu_{0.25})_{25}$, $Nd_{75}(Co_{0.5}Cu_{0.5})_{25}$, $Nd_{75}(Co_{0.25}Cu_{0.75})_{25}$. Основным материалом для эксперимента стал порошок марки MQP-B, представляющий собой быстрозакаленный сплав, состав которого приведен в таблице 1. Порошки смешивались между собой в соотношении 20/80 % мас.

Таблица 1. Состав сплава марки MQP-B

	Содержание, мас.%						
Название	Nd	Pr	Dy	B	Al	Fe	Co
MQP-B	26.1	0.2	0.6	1.0	0.1	66.9	5.1

Затем готовые смеси были спрессованы в параллелепипеды и подготовлены к отжигу. Был взят интервал температур 550–650 °C. Время отжига — 1 час. Такие параметры отжига выбраны для установления влияния параметров термообработок на получающиеся магнитные гистерезисные свойства образов магнитотвердых материалов.

Также были подготовлены образцы без использования процедуры прессования. Для этого порошки свободно насыпались в ампулы из кварцевого стекла, вакуумировались и отжигались при температуре 650 °C в течение 1 часа. Образец с добавкой $Nd_{75}Cu_{25}$ дополнительно был отожжен при 600 °C.

Предельные петли магнитного гистерезиса отожженных образцов измерялись посредством PPMS DynaCool с установленной опцией VSM.

Полученные значения коэрцитивной силы более чем в два раза превышают значение H_c исходного сплава марки MQP-B ($\approx$ 10 кЭ):

H_c прессованных образцов составила от 24.4 до 25.6 кЭ;

H_c свободно насыпанных порошков сплавов — от 22.3 до 25.3 кЭ. Наибольшие значения H_c наблюдаются при следующих условиях отжига: температура отжига $T_a = 600$ °C, добавка $Nd_{75}Cu_{25}$.

Гистерезисные свойства и динамика магнитных доменных границ в монокристалле феррита-граната в области температуры магнитной компенсации

К.Е. Гуляев*, Н.С. Растрепенина, М.С. Лысов, Д.С. Мехоношин, Л.А. Памятных

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: evilcows950@mail.ru

В настоящее время динамика магнитных доменных границ (ДГ) является широко развиваемым направлением спинтроники. Высокие скорости движения доменных границ могут быть достигнуты в антиферромагнетиках и ферримагнетиках в области магнитной компенсации [1].

Настоящая работа посвящена исследованию гистерезисных свойств и динамики магнитных доменных границ в монокристаллической пластине-(111) феррита-граната $(TbErGd)_3(FeAl)_5O_{12}$ в диапазоне температур 77 – 305 К, включающем область магнитной компенсации $\Delta T_K \approx 180 - 190$ К. Измерение петель гистерезиса и визуализация магнитной доменной структуры (ДС) осуществлялись с помощью магнитооптической методики на основе эффекта Фарадея.

Из сопоставления результатов наблюдений ДС с видом магнитооптических петель гистерезиса показано, что в окрестности температуры компенсации T_K по разные ее стороны наблюдается особенность на температурной зависимости магнитного поля, выше которого намагничивание кристалла происходит путем однородного вращения по всему образцу (на рис. 1a это поле монодоменного состояния H_m).

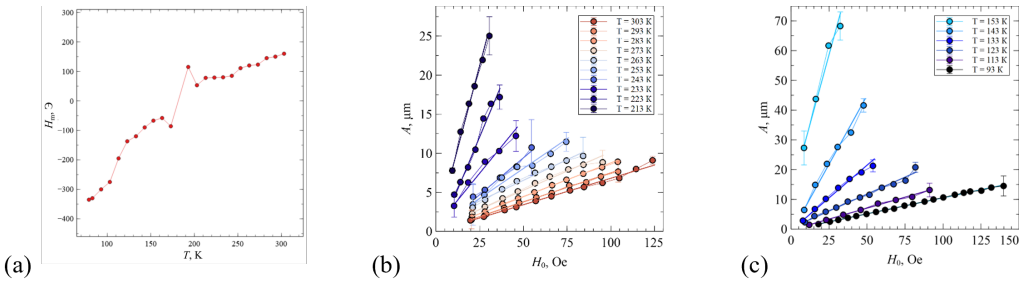


Рис. 1. a — зависимость поля достижения монодоменного состояния H_m от температуры, (b),(c) — зависимости амплитуды колебаний доменных границ A от амплитуды переменного поля H_0 с частотой $f = 120.5$ Гц (b) при $T > T_K$, (c) при $T < T_K$.

Измерена амплитуда A колебаний ДГ в гармоническом магнитном поле с частотой $f = 120.5$ Гц в зависимости от амплитуды поля H_0 и температуры T. Зависимость амплитуды колебаний ДГ от амплитуды переменного поля линейна, при $T > T_K$ с уменьшением температуры тангенс угла наклона прямой $A(H_0)$ при приближении к температуре компенсации увеличивается (рис. 1b), при $T < T_K$ с уменьшением температуры тангенс угла наклона уменьшается (рис. 1c). При $T > T_K$ форма колебаний доменных границ значительно отличается от синусоидальной, при $T < T_K$ колебания близки к синусоиде по форме. Полученные экспериментальные результаты работы согласуются с теоретической моделью полосовой ДС [2-3].

1. З.В. Гареева, С.М. Чен, Письма в ЖЭТФ **114**, 250 (2021).

2. C. Kooy, U. Enz, Philips Res. Rep. **15**, 7 (1960).

3. A. Hubert, R. Schäfer, New York: Springer Science and Business Media (2008).

Первопринципные расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика $CrNb_3S_6$

Д.В. Евсин*, В.О. Борзилов, М.В. Мамонова, П.В. Прудников

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

*e–mail: evsindv@stud.omsu.ru

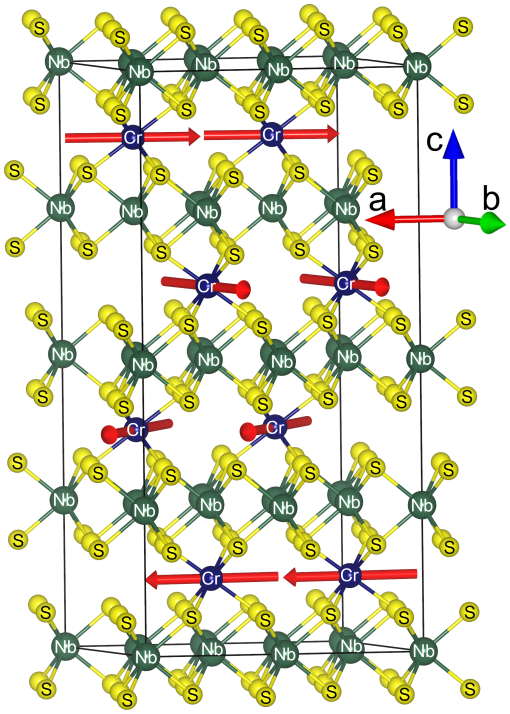


Рис. 1. Кристаллическая структура одноосного гелимагнетика $CrNb_3S_6$. Стрелки указывают направление намагниченности атомов Cr.

Магнитные кристаллы со слоистой структурой, в которых наблюдается периодическое киральное гелимагнитное упорядочение, интересны в качестве материалов для устройств спинтроники [1]. К таким структурам относится гелимагнетик $CrNb_3S_6$, обладающий кристаллографической киральностью и одноосным взаимодействием Дзялошинского-Мория [2]. Экспериментальные исследования показали зависимость периода кирального гелимагнетика от внешнего магнитного поля при постоянной температуре, а именно переход к состоянию киральной солитонной решетки в тонких сколах [3].

В данной работе исследуются магнитные свойства гелимагнетика $CrNb_3S_6$ путём первопринципных расчётов с применением пакета VASP [4]. Кристаллическая структура исследуемой системы $CrNb_3S_6$ представлена на рис. 1. В расчётах использовалась 80-атомная суперъячейка с постоянной решетки $a = 24.202$ Å, [5]. Количество k-точек сетки Монкхорста-Пака принималось равным 4. Величина энергии обрезания устанавливалась равной 500 эВ. Для удвоенной вдоль оси z суперъячейки вектор распространения спиновой спирали задавался $q = 0.25a$ по направлению вдоль оси z. В ходе расчётов были получены значения проекций магнитных моментов атомов суперъячейки. Также было получено значение полной энергии системы $E_{\text{tot}} = -603.679$ эВ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (договор 0741-2020-0002). Для выполнения расчётов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

1. Y. Togawa, Y. Kousaka, K. Inoue, K. Kishine, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 112001 (2016).

2. D. Song, et al., Phys. Rev. B. **102**, 64432 (2020).

3. Y. Togawa, et al., Phys. Rev. L. **122**, 017204 (2019).

4. G. Kresse, M. Marsman, J. Furthmuller, VASP the GUIDE. Wien:Universitat Wien (2016).

5. Y. Ghimire, et al., Phys. Rev. B. **87**, 104403 (2013).

Изменение магнитотранспортных свойств спиновых клапанов на основе обменно-связанных слоев хирального магнетика Dy и сплава $Co_{90}Fe_{10}$ в процессе интердиффузии

Р.С. Заворницын*, Л.И. Наумова, М.А. Миляев, М.В. Макарова, В.В. Проглядо, А.С. Русалина, 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 спиновых клапанов, содержащих композицию CoFe/Dy/CoFe в нижней части структуры, проведено исследование влияния длительного хранения и термического воздействия на микроструктуру и магнитотранспортные свойства.

Для спиновых клапанов с различной толщиной слоя Dy определена температура компенсации (T_{comp}), при которой реализуется равенство магнитных моментов подрешеток $Co_{90}Fe_{10}$ и Dy. Оценка T_{comp} проведена для спиновых клапанов сразу поле напыления, после хранения в течение 3 месяцев, после хранения и отжига при $T = 373$ K в течение 30 минут. Изменение T_{comp} при хранении и нагреве спиновых клапанов используется как мера интенсивности диффузионных процессов в системе CoFe/Dy/CoFe.

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

1. Структурные исследования показали, что в процессе диффузии атомы Co и Fe внедряются в кристаллическую решетку Dy, что приводит к уменьшению фактической толщины слоев CoFe и Dy и разрастанию интерфейсной области Dy-Co-Fe. По мере уменьшения номинальной толщины слоя диспрозия от 60 до 10 нм эти диффузионные изменения структуры становятся менее заметными. Это обусловлено тем, что при малой толщине слоя Dy большая часть его перемешивается с атомами Co и Fe уже на стадии напыления.

2. При понижении температуры происходит инверсия магниторезистивной кривой спинового клапана, содержащего прослойку Dy в референтном слое. Инверсия вызвана тем, что в обменно-связанной магнитной системе CoFe/Dy/CoFe происходит компенсация магнитных моментов CoFe и Dy. Увеличение толщины слоя Dy, а также диффузионное разрастание интерфейса Dy-Co-Fe и сопутствующее уменьшение толщины слоя CoFe приводит к повышению температуры компенсации.

3. В структуре CoFe/Dy/CoFe по крайней мере в течение 3 месяцев после напыления содержится чистый гелимагнитный Dy, атомы которого не участвуют в сперимагнитном упорядочении в составе интерфейса Dy-Co-Fe. Это справедливо, в том числе, для слоя Dy номинальная толщина (4 нм) которого соизмерима с пространственным периодом антиферромагнитного геликоида.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 22-22-00220.

Детектор магнитного поля на основе магнитоуправляемого спинового светодиода

А.В. Здоровейщев[1]*, М.В. Ведь[1], М.В. Дорохин[1,2], П.Б. Дёмина[1], Д.А. Здоровейщев[1,2], Ю.А. Дудин[1], В.Е. Котомина[1]

[1]НИФТИ ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
[2]ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
*e–mail: zdorovei@nifti.unn.ru

Разработка малогабаритного быстродействующего автономного беспроводного детектора (визуализатора) магнитного поля является актуальной задачей, поскольку он может найти широкое применение в различных отраслях науки и техники. В настоящей работе сообщается о создании лабораторной модели прибора, функционирование которого осуществляется за счет совмещения двух базовых элементов спинтроники (магниторезистивного элемента и спинового светодиода), с помощью которых удается независимо детектировать продольную и поперечную прибору компоненты магнитного поля.

Магниторезистивный спиновый светодиод, исследуемый в данной работе, представляет собой последовательно соединённые светоизлучающую гетероструктуру на основе квантовой ямы InGaAs/GaAs со спиновым инжектором CoPd и магниторезистивный элемент, состоящий из слоёв $Cr/Co_{90}Fe_{10}/Cu/Co_{90}Fe_{10}$. Питание устройства осуществляется в режиме источника тока. На рис. 1(а) показана зависимость относительной интенсивности электролюминесценции (ЭЛ) прибора от продольного магнитного поля. Наблюдаемая модуляция интенсивности ЭЛ связана с изменением сопротивления магниторезистивного контактного слоя. При токе 36 мА прибор работает в ключевом режиме: в магнитном поле 4 ± 50 мТл относительная интенсивность принимает максимальные значения; в нулевом магнитном поле и в поле выше 100 мТл она равна нулю.

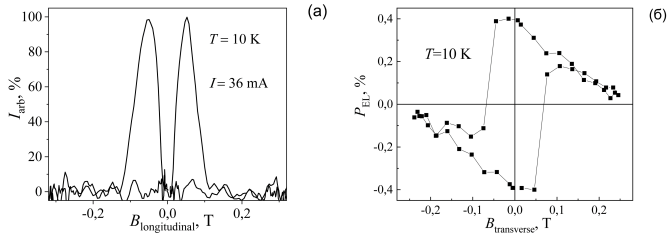


Рис. 1. Магнитополевые зависимости (а) относительной интенсивности излучения и (б) степени циркулярной поляризации излучения для комбинированного прибора.

Объяснение наиболее вероятного механизма изменения интенсивности ЭЛ в продольном магнитном поле представлено в [1]. При помещении прибора в поперечное магнитное поле излучение становится частично циркулярно-поляризованным. На рис. 1(б) показана зависимость степени циркулярной поляризации ЭЛ (P_{EL}) от поперечного магнитного поля. Максимальное значение P_{EL} составило 0.4%. Линейный наклон в магнитных полях более 0.1 Тл (по абсолютной величине) предположительно связан с зеемановским расщеплением энергетических уровней в квантовой яме.

Таким образом, в ходе данной работы был изготовлен лабораторный образец прибора, имеющий четыре независимо изменяемых состояния (излучение высокой/низкой интенсивности с правой/левой циркулярной поляризацией), которые соответствуют наличию продольных и поперечных компонент магнитного поля.

Работа выполнена в рамках базовой части государственного задания № 0729-2020-0060.

1. M. Ved *et al.*, Appl. Phys. Lett. **118**, 092402 (2021).

Магнитные и магнитокалорические свойства ленточного образца сплава Гейслера $Ni_{45}Co_5Mn_{31}Al_{19}$: экспериментальные и теоретические исследования

А.Т. Кадырбардеев[1]*, А.Г. Гамзатов[1], А.М. Алиев[1], В.В. Соколовский[1,2]

[1]Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
[2]Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
*e–mail: anvar.kadirbardeev@gmail.com

Сплавы Гейслера являются перспективными функциональными материалами для применения в технологиях магнитного охлаждения, это связано с тем, что данные материалы обладают большой величиной магнитокалорического эффекта (МКЭ), как положительного, так и отрицательного, а также памятью формы.

В данной работе приводятся результаты экспериментальных и теоретических исследований магнитокалорических свойств ленточного образца сплава $Ni_{45}Co_5Mn_{31}Al_{19}$ в интервале $T = 80 - 350$ K в магнитных полях до 8 Тл (рис. 1a-c). Данный сплав демонстрирует магнитоструктурный фазовый переход (МСФП) 1-го рода в области температур 270 K, а также переход 2-го рода — при температуре Кюри 294 K. МКЭ исследовался как прямым методом модуляции магнитного поля в циклических полях до 8 Тл, так и классическим экстракционным методом. Полевые зависимости МКЭ имеют различный характер для фазовых переходов I и II рода (рис. 1c). Вблизи МСФП обратный МКЭ необратим, т. е. конечная температура образца ниже начальной на 0.75 K. Теоретические исследования магнитных свойств и МКЭ исследуемого образца выполнены с помощью *ab initio* расчетов и моделирования методом Монте-Карло. Теоретические температурные зависимости МКЭ характеризуются схожим интервалом проявления эффекта в области мартенситного превращения и более узким интервалом в области температуры Кюри аустенита по сравнению с экспериментом, что обусловлено наличием неоднородного смешанного состояния аустенита в экспериментальном образце. В целом, теоретические данные качественно и количественно воспроизводят экспериментальные зависимости.

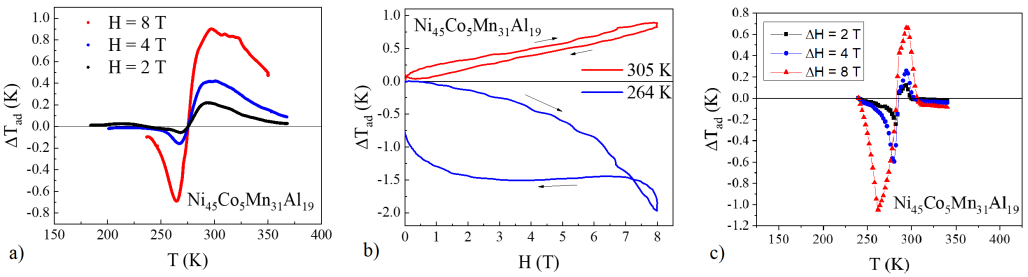


Рис. 1. a) Температурная зависимость МКЭ в режиме нагрева в циклических полях 2, 4 и 8 Тл. b) Полевые зависимости МКЭ вблизи МСФП и магнитного ФП при разовом включении/выключении магнитного поля 8 Тл. c) Теоретические зависимости МКЭ в полях 2, 4 и 8 Тл, полученные при нагреве.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-19-00610.

Магнитные свойства $(R_{1-x}Y_x)(Co_{0.84}Fe_{0.16})$, где $R = Dy, Ho, Tm$ с метамагнитными переходами

М.С. Аникин*, Е.Н. Тарасов, М.И. Князев, А.В. Зинин
Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: maksim.anikin@urfu.ru

Ранее, на соединениях $R(Co_{0.88}Fe_{0.12})_2$ с тяжелыми редкоземельными металлами (R) обнаружено, что при увеличении атомного номера элемента R от Gd до Er происходит изменение формы температурной зависимости изменения магнитной части энтропии (ΔS_m) от классического пика при температуре Кюри (T_C) к платоподобной зависимости, охватывающей диапазон температур от T_C и ниже (до 50 К) [1]. Появление платоподобной зависимости $\Delta S_m(T)$ объясняется суперпозицией максимумов ΔS_m при T_C и «низкотемпературного» максимума ΔS_m. Последний возникает из-за восстановления внешним магнитным полем магнитного момента элемента R, частично разупорядоченного из-за слабого межподрешеточного обменного взаимодействия $R-3d$. Позже, в системах $R_{1-x}Y_x(Co_{0.84}Fe_{0.16})_2$, с R = Ho, Tm, с ослабленной энергией межподрешеточного обменного взаимодействия, за счет введения атомов иттрия, обнаружены метамагнитные переходы на кривых намагничивания при 5 К для $Ho_{0.2}Y_{0.8}(Co_{0.84}Fe_{0.16})_2$ и $Tm_{0.4}Y_{0.6}(Co_{0.84}Fe_{0.16})_2$ [2, 3]. В данной работе поставлена задача определения причин возникновения метамагнитных переходов на указанных соединениях и в соединении $Dy_{0.2}Y_{0.8}(Co_{0.84}Fe_{0.16})_2$.

Все соединения с метамагнитным переходом демонстрируют двухступенчатое намагничивание. Первый переход наблюдается в магнитных полях до 20 кЭ, является частью петли гистерезиса и связан со смещением доменных границ и вращением векторов намагниченности, второй (высокополевой) наблюдается в магнитных полях с напряженностью $\geqslant$ 45 кЭ и является метамагнитным переходом. Учитывая, что при 5 К, для соединений с R = Dy, Ho результирующая намагниченность (σ) сонаправлена с намагниченностью $3d$ подрешетки (σ_{3d}), а для R = Tm σ сонаправлена с намагниченностью R подрешетки (σ_R), следует ожидать различных причин возникновения метамагнитного перехода. В соединениях с R = Dy, Ho происходит смещение поля старта метамагнитного перехода (H_{start}) в большие по напряженности магнитные поля с увеличением температуры. Для соединения с Tm зависимость $H_{start}(T)$ является более сложной, в интервале температур 5-30 К H_{start} практически неизменно и лежит в интервале 45-50 кЭ, рост H_{start} происходит при температурах $\geqslant$ 40 К. Однако, в соединении с Tm есть точка магнитной компенсации (T_{comp}) при 22 К, что может приводить к изменению природы метамагнитного перехода.

Из анализа полученных температурных и полевых зависимостей σ и ΔS_m в магнитных полях до 90 кЭ и температурах от 2 до 390 К, и с учетом данных [1,4], следует, что возможной причиной возникновения метамагнитного перехода, сопровождающегося ростом σ выше H_{start}, в соединении с R = Tm ниже T_{comp} может быть изменение основного состояния иона Tm, вызванное соответствующим увеличением эффективного поля, действующего на атомы Tm [4]. В соединениях с R = Dy и Ho, и в соединении с R = Tm выше T_{comp} появление метамагнитного перехода может быть вызвано увеличением эффективного поля, действующего на атомы кобальта.

Работа выполнена при поддержке Государственного контракта FEUZ-2020-0051 между УрФУ и Министерством высшего образования РФ.

1. М.С. Аникин *и др.*, Металловедение и термическая обработка металлов **758**, 36 (2018).
2. М.С. Аникин *и др.*, Физика твердого тела **63**, 1795 (2021).
3. М.С. Аникин *и др.*, Физика мететаллов и металловедения **123**, 436 (2022).
4. P.E. Brommer *et al.*, Phys. B **211**, 155 (1995).

Исследование влияния поверхностно-активных добавок на вибрационное измельчение и свойства спеченных магнитов сплава Nd-Fe-B

К.А. Кручинина[1]*, О.А. Головня[1,2], А.В. Протасов[1,2], Д.А. Колодкин[2], А.Г. Попов[1,2], А.В. Шитов[2], Д.В. Таранов[3], А.В. Огурцов[3], М.К. Шарин[3]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]ПОЗ-Прогресс, В. Пышма, Россия
*e–mail: kruchinina_2001@bk.ru

При изготовлении постоянных магнитов окисление тонких порошков наиболее сильно ухудшает свойства готовых магнитов, поэтому защита от окисления — это основная задача в технологическом процессе. Инновационная технология изготовления спеченных магнитов Nd-Fe-B, предложенная М. Сагава в 2008 году, — процесс без прессования, исключает стадию прессования порошка, таким образом, упрощая его защиту от кислорода [1]. Дополнительная защита порошков может быть достигнута при использовании поверхностно-активных веществ (ПАВ) [2].

Целью данной работы является исследование влияния поверхностно-активных веществ и времени измельчения в вибрационной мельнице порошка сплава Nd-Fe-B на морфологию частиц.

Для исследования было приготовлено восемь порошковых образцов и четыре спеченных магнита из сплава 35.00 вес. % Nd 63.98 вес. % Fe 1.02 вес. % B. Порошковые образцы были получены при различных временах измельчения (от 45 до 120 мин) и концентрациях ПАВ (0.5% силоксан).

На порошковых образцах и спеченных магнитах были проведены исследования сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) (рис. 1(а),(б)) и построены статистические распределения размеров частиц и зёрен (рис. 1(в)).

По результатам измерений можно сделать выводы, что распределение размеров частиц порошка бимодально, что соответствует присутствию двух фракций порошка с разным средним размером. Кроме того, показано, что ПАВ – силоксан – способствует более интенсивному измельчению порошка. Добавка силоксана способствует улучшению плотности, остаточной индукции и коэрцитивной силы магнитов. Также, силоксан частично действует как антиоксидант, т. е. защищает частицы от окисления.

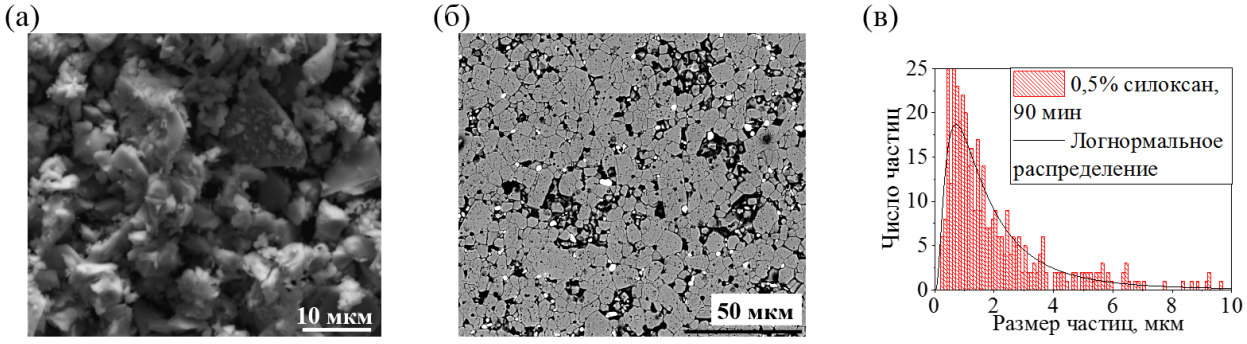


Рис. 1. (а) — СЭМ-изображение порошка сплава Nd-Fe-B; (б) — СЭМ-изображение травленого шлифа спеченного магнита сплава Nd-Fe-B; (в) — распределение частиц порошкового образца по размерам

1. M. Sagawa *et al.*, International Workshop on Rare Earth Permanent Magnets and their applications **20**, 103 (2008).
2. A.G. Popov *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **386**, 134 (2015).

Влияние обработки ацетоном на изменение магнитных характеристик аморфного магнитомягкого сплава на основе кобальта с течением времени

А.А. Лигус, Е.С. Некрасов, Н.А. Скулкина*

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: nadezhda-skulkina@yandex.ru

Ацетон широко применяется при использовании лент аморфных сплавов: например, для обезжиривания поверхностей материалов или изготовления изделий из этих материалов. Ацетон является химически активной средой, оказывающей влияние на свойства материала. Исследования показали, что при взаимодействии ацетона с поверхностью ленты изменяется распределение намагниченности и максимальная магнитная проницаемость [1]. В настоящей работе представлены результаты исследования влияния обработки ацетоном на изменение магнитных характеристик аморфного магнитомягкого сплава Co-Fe-Ni-Cr-Mn-Si-B с течением времени. Эта задача является актуальной, т. к. временная стабильность магнитных свойств является важной эксплуатационной характеристикой изделий. Исследования проводили на образцах в форме полос размерами $100\times10\times0.020$ мм, после термообработки (ТО) на воздухе при 370°С с длительностью изотермической выдержки $t = 10$ мин, формирующей состояние с отрицательной константой магнитострикции $\lambda_s<0$ [1]. Объем доменов с ортогональной ($V_{орт}$) и планарной намагниченностью, ориентированной вдоль V_{180} и поперек V_{90} оси ленты, определяли с помощью авторской методики [2]. Остроту магнитной текстуры в плоскости ленты характеризует $\eta=V_{180}/\ V_{90}$.

Таблица 1. Магнитные характеристики ленты аморфного сплава Co-Ni-Fe-Cr-Mn-Si-B после термообработки на воздухе при 370 °С ($t = 10$ мин), обработок ацетоном (ОА), водой (ОВ) и двухлетнего вылеживания

Исходное состояние	μ_{max}	V_{90}, %	η	Исходное состояние	μ_{max}	V_{90}, %	η
ТО	490000	9.4	1.71	ТО	510000	10.0	1.77
2 года	570000	8.5	1.70	ОА	500000	10.5	1.53
ОВ	600000	8.2	2.73	2 года	540000	9.0	1.30

Представленные в левой части таблицы 1 результаты показывают, что на протяжении двух лет произошло повышение μ_{max} вследствие снижения $V_{орт}$ и связанного с этим уменьшения стабилизации границ доменов с планарной намагниченностью. Это может быть обусловлено увеличением объемной компоненты растягивающих напряжений в состоянии с $\lambda_s<0$. Последующая обработка поверхности ленты водой показала, что знак λ_s не изменился, поскольку преимущественно плоские растягивающие напряжения, индуцируемые повышенной концентрацией внедренных в поверхность ленты атомов водорода и кислорода способствуют переориентации намагниченности вдоль оси ленты, повышая η. Качественно аналогичное изменение μ_{max} и $V_{орт}$ имеет место на протяжении 2 лет и после обработки поверхности ленты ацетоном в силу тех же причин. Тем не менее более сильное уменьшение $V_{орт}$ свидетельствует об активизации процессов поверхностной кристаллизации из-за снижения концентрации атомов кислорода и водорода в поверхностном слое ленты.

1. Н.А. Скулкина *и др.*, ФММ **122**, 1142 (2021).

2. Н.А. Скулкина *и др.*, ФММ **118**, 1248 (2017).

Теоретические расчеты магнитной анизотропии в трехслойных металлических наноструктурах в зависимости от толщины слоев

М.В. Мамонова*, М.Ю. Макеев
Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского, Омск, Россия
*e–mail: mamonovamv@omsu.ru

Результаты экспериментов[1] и наших расчетов методом Монте-Карло [2] показали, что случай перпендикулярной анизотропии приводит к полезному увеличению магнитосопротивления. Но для сравнения результатов численного моделирования с экспериментом необходимо знать тип анизотропии и значение параметра анизотропии для конкретных систем. Поэтому данная работа посвящена исследованию магнитной анизотропии пленок Fe, разделенных слоями Cr и Pt методом функционала спиновой плотности с использованием программного комплекса VASP[3]. Были определены магнитные моменты и вычислены значения энергии магнитной анизотропии в зависимости от ориентации поверхностной грани и толщины слоев. Рассчитан параметр анизотропии Δ для анизотропии типа легкая ось и анизотропии типа легкая плоскость.

Таблица 1. Результаты расчетов энергии магнитной анизотропии E_{MA}, мэВ.

Число монослоев Fe	Грань	Fe/Cr/Fe $\perp$[4]	Fe/Pt/Fe
1	100	-0.984	-2.295 $\perp$[5]
	110	-0.628	3.531
2	100	-0.592	1.447
	110	-0.473	-1.237
3	100	-0.384	-2.38
	110	-0.377	-1.108

Результаты исследования показали, что для системы Fe/3Cr/Fe было получено преимущество перпендикулярной анизотропии при всех рассмотренных толщинах пленки Fe и ориентациях поверхностной грани. Для системы Fe/Pt/Fe перпендикулярная анизотропия для монослойной пленки Fe возникает для грани (100) для всех рассмотренных толщин пластины Pt и для грани (110) для пластины Pt толщиной в 5 моноатомных слоев. Для грани (111) получена преимущественная ориентация в плоскости. С увеличением толщины пленки Fe в системе Fe/Pt/Fe для всех ориентаций преобладает плоскостная анизотропия. С увеличением толщины пленки абсолютное значение E_{MA} уменьшается. Значение E_{MA} и намагниченности для Fe/Pt/Fe намного выше, чем для Fe/Cr/Fe. Результаты расчета параметра анизотропии Δ для системы Co/Cu(100) хорошо согласуется с аппроксимацией экспериментальных данных. Полученные нами результаты могут быть применены при численном моделировании методом Монте-Карло и расчете коэффициента ГМС.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002). Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

1. M. T. Johnson *et al.*, Rep. Prog. Phys. **59**, 1409 (1996)
2. P.V. Prudnikov *et al.*, JMMM **470**, 201 (2019)
3. P.G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
4. H. Fritzscht *et al.*, MRS Proceedings **313**, 671 (1993)
5. M. Tsujikawa *et al.*, Phys. Rev. B **77**, 054413 (2008)

Теоретические исследования структурных и магнитных свойств сплавов Fe – Ga

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

Сплавы на основе системы Fe-Ga являются альтернативными материалами высокострикционным редкоземельным магнетикам благодаря гигантской величине магнитострикции в низких магнитных полях, хорошей пластичности, слабой зависимости магнитомеханических свойств в широком диапазоне температур и высокой температуре Кюри [1-6]. Обнаруженные свойства способствовали применению магнитострикционных сплавов Fe-Ga в качестве датчиков в электронных приборах, магнитострикционных приводов в микроэлектромеханических системах и сенсорных устройствах [7]. В течение последних 20 лет интерес экспериментальных и теоретических групп фокусируется на изучении структурных и магнитных свойств, особенностях фазового состава и фазовых превращениях, наблюдаемых при различных режимах изготовления образцов, а также их влияния на магнитострикцию, упругие и магнитоупругие свойства. Наиболее востребованной и широко изучаемой областью в сплавах Fe-Ga является область концентрации Ga до 30 ат.%, характеризующаяся необычным поведением постоянной тетрагональной магнитострикции. Обзор теоретических работ, с одной стороны, показал хорошую предсказательную силу теории функционала плотности при описании электронных, упругих и магнитных свойств сплавов Fe-Ga, с другой стороны, исследования ограничены рассмотрением отдельных композиций с содержанием галлия до 25 ат.% в отдельных структурах кубической симметрии A2, B2 и $D0_3$.

Работа посвящена комплексному исследованию структурных и магнитных свойств сплавов $Fe_{100-x}Ga_x$ ($3.125 \leqslant x \leqslant 31.25$ ат.%), основанному на сочетании первопринципных методов и метода Монте-Карло. При помощи теории функционала плотности, реализованного в программном пакете VASP [8, 9] в рамках подхода суперъячеек были исследованы концентрационные зависимости постоянных тензора упругости в кристаллических структурах A2, B2, $D0_3$ и $L1_2$. Проведена оценка постоянных тетрагональной магнитострикции λ_{001} в фазах A2, $D0_3$ и $L1_2$. *Ab initio* расчёты параметров обменного взаимодействия, выполненные при помощи программного пакета SPR-KKR [10], совместно с моделированием методом Монте-Карло позволили определить температурные зависимости намагниченности и концентрационные зависимости температур Кюри в кристаллических структурах A2, B2, $D0_3$ и $L1_2$.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Минобрнауки РФ № 075-01391-22-00.

1. A.E. Clark *et al.*, Mater. **43**, 881 (2002).
2. A.E. Clark *et al.*, J. Appl. Phys. **93**, 8621 (2003).
3. A.E. Clark *et al.*, IEEE Trans. Magn. **36**, 3238 (2000).
4. S. Guruswamy *et al.*, Scr. Mater. **43**, 239 (2000).
5. R. Kellogg *et al.*, Acta Mater. **52**, 5043 (2004).
6. Q. Xing *et al.*, Acta Mater. **56**, 4536 (2008).
7. K.H.J. Buschow, Handbook of Magnetic Materials. – Amsterdam: Elsevier Science B.V (2012).
8. G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. B. **54**, 11169 (1996).
9. G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. B. **59**, 1758 (1999).
10. H. Ebert *et al.*, Rep. Prog. Phys. **74**, 096501 (2011).

Магнитоимпедансный эффект в аморфных магнитомягких проводах и радиальное распределение магнитной проницаемости: моделирование и эксперимент

И.М. Мацюк[1]*, М.С. Деревянко[2], Д.А. Букреев[2]

[1]Иркутский национальный исследовательский технический университет, Иркутск, Россия
[2]Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия
*e–mail: rezervimm@gmail.com

В магнитомягких материалах, в том числе, в аморфных проводах на основе кобальта, наблюдается эффект магнитоимпеданса [1]. Особенности данного эффекта зависят от радиального распределения магнитной проницаемости $\mu(r)$. В данной работе мы смоделировали зависимости импеданса от магнитного поля и частоты переменного тока методом конечных элементов при различных $\mu(r)$. Смоделированные зависимости сравнили с экспериментальными, полученными при исследовании проводов $Co_{66}Fe_4Nb_{2,5}Si_{12,5}B_{15}$ радиусом 90 мкм и длиной 30 мм. Измерение импеданса проводили с помощью измерительной установки [2] в диапазоне частот переменного тока f от 0.1 до 80 МГц. Внешнее магнитное поле H было ориентировано вдоль образца. Его максимальная напряженность достигала 150 Э. Моделирование выполняли с помощью программного пакета `Comsol Multiphysics` (лицензия №9602434) в диапазоне f от 0.01 до 80 МГц. Модель провода разбивали на три коаксиальные области радиусов r_1, r_2 и r_3 с магнитными проницаемостями μ_1, μ_2 и μ_3 (рис. 1, вставка). Радиусы областей r_1 и r_2 варьировали от 70 до 85 и 80 до 89.5 мкм, $r_3 = 90$ мкм. Удельную электропроводность σ принимали равной 870 kS/m. Магнитную проницаемость каждой области независимо варьировали от 1 до 20000, получая массив зависимостей $Z(f)$, соответствующих различным комбинациям магнитных проницаемостей.

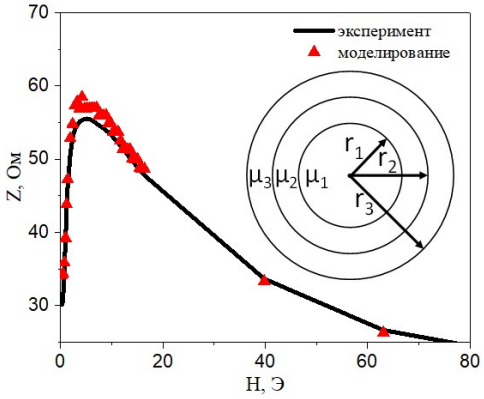


Рис. 1. Зависимость $Z(H)$ при f = 80 МГц.

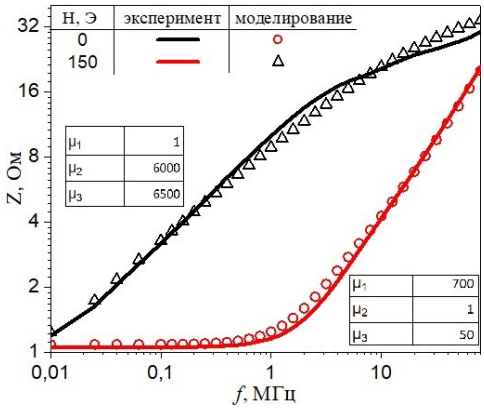


Рис. 2. Зависимости $Z(f)$ при $H =$ 0 и 150 Э.

Сопоставляя смоделированные зависимости $Z(f)$ с экспериментальными, для каждого исследованного H определили значения μ_1, μ_2, μ_3, при которых наблюдается наименьшее отклонение. При этом наиболее точный результат (относительное отклонение не более 8% для всех исследованных значений f и H) даёт модель с r_1 = 85 мкм и $r_2 = 89$ мкм (рис. 2). Можно предположить, что подобранные значения магнитных проницаемостей μ_1, μ_2 и μ_3 (значения проницаемостей указаны на рис. 2) приближенно описывают реальное радиальное распределение магнитной проницаемости. Также восстановили зависимости магнитных проницаемостей μ_1, μ_2 и μ_3 от H. Используя эти зависимости, смоделировали зависимость $Z(H)$. Смоделированная зависимость (рис. 1, пустые маркеры) очень хорошо совпадает с экспериментальной (рис. 1, сплошные линии). Для более детального изучения распределения магнитных проницаемостей необходимо рассматривать модели с большим количеством областей, а также учитывать влияние доменной структуры.

1. R.S. Beach *et al.*, Applied Physics Letters **64**, 3652 (1994).
2. D.A. Bukreev *et al.*, Materials **13**, 3216 (2020).

Магнитокалорический эффект в сплавах Gd_xPd_{1-x} в циклических магнитных полях

А.А. Мухучев[1]*, А.М. Алиев[1], V. Franco[2]

[1]Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
[2]Department of Condensed Matter Physics, ICMS-CSIC, Universidad de Sevilla, Spain
*e–mail: mukhuch87@mail.ru

Интерес к магнитокалорическому эффекту (МКЭ) не ослабевает, т.к. на его основе можно создать магнитные охлаждающие системы, которые являются более экологически чистыми и энергоэффективными по сравнению с классическими холодильными устройствами, работающими на основе фреона. Магнитокалорические свойства материалов существенно зависят от рода фазового перехода. Гигантские значения МКЭ наблюдаются в материалах с магнитоструктурными фазовыми переходами 1-го рода, но из-за присущих таким материалам гистерезисных явлений, для индуцирования обратимых фазовых переходов требуются сильные магнитные поля, что ограничивает возможное использование таких материалов. В материалах с фазовыми переходами второго рода, эффект наблюдается в более широкой области температур, но величина эффекта в большинстве материалов меньше, чем в материалах с магнитоструктурными фазовыми переходами. Идеальным материалом будет тот, который демонстрирует лучшее из обоих классов: большой отклик от магнитной системы с негистерезисным обратимым поведением вблизи комнатных температур. Одними их перспективных материалов считают различные сплавы на основе гадолиния.

В данной работе приводятся результаты исследования магнитокалорического эффекта сплавов $Gd_{80}Pd_{20}$, $Gd_{85}Pd_{15}$, $Gd_{90}Pd_{10}$ и $Gd_{95}Pd_5$, в которых наблюдаются два фазовых перехода 2-го рода и соответственно две аномалии МКЭ [1]. Исследование магнитокалорического эффекта проводилось модуляционным методом в циклических магнитных полях амплитудой до 8 Тл в интервале температур от 200 - 360 К и при частотах до 20 Гц. При исследовании зависимости $\Delta T_{ad}(T)$ в циклических магнитных полях (1.8, 4 и 8 Тл) величина максимума первой аномалии МКЭ ($T_c \sim 294$ К) растет с увеличением концентрации Pd, а второй соответственно уменьшается. Также величина ΔT_{max} для первой фазы больше, чем для второй фазы ($T_c \sim 340$ К). Большие значения МКЭ наблюдаются в широком температурном диапазоне. В слабых же магнитных полях ($\Delta H = 0.05, 0.1, 0.2$ Тл) для составов $Gd_{80}Pd_{20}$ и $Gd_{85}Pd_{15}$ величина ΔT_{max} для первой фазы, наоборот, меньше, чем для второй фазы. Исследования частотной зависимости МКЭ ($\Delta H = 6.2$ кЭ) показывают, что при частоте 20 Гц величина эффекта по сравнению с МКЭ при частоте 0.5 Гц уменьшается $\sim 5\%$ во всех сплавах. Предложен метод оценки охлаждающей эффективности (RCP) для двухфазных систем.

Полученные результаты показывают, что данные материалы обладают большим значением МКЭ вблизи комнатных температур, в широком температурном диапазоне, также в данных материалах отсутствует гистерезисный эффект и они практически не зависят от частоты изменения магнитного поля дает возможность утверждать, что данные материалы являются хорошими кандидатами для использования в системе магнитного охлаждения.

Работа выполнена в рамках государственного задания № АААА-А17-117021310366-5.

1. Á. Díaz-García *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **72**, 2845 (2020).

Изменение магнитных характеристик аморфного магнитомягкого сплава на основе кобальта в результате низкотемпературного отжига

Е.С. Некрасов, Н.А. Скулкина*

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: nadezhda-skulkina@yandex.ru

Ленты быстрозакаленного аморфного магнитомягкого сплава АМАГ-172 широко применяются при изготовлении магнитных экранов, так как обладают высокими значениями максимальной магнитной проницаемости (μ_{max}). В закаленном состоянии уровень магнитных характеристик низок. Это обусловлено высоким уровнем внутренних напряжений и их существенной неоднородностью. Основным приемом улучшения магнитных свойств являются термообработки (ТО). Помимо диффузионных процессов, термообработка сопровождается процессами другого типа: выходом свободного объема, поверхностной кристаллизацией, взаимодействием с атмосферным паром. Процессы этого типа индуцируют в ленте анизотропные напряжения, которые тоже оказывают влияние на магнитные характеристики. В настоящей работе исследовали влияние низкотемпературного отжига при 90–250°С на распределение намагниченности и максимальную магнитную проницаемость с целью выявления влияния сопутствующих факторов на эти характеристики. Исследовали образцы в форме полос размерами $100\times10\times0.020$ мм. Объем доменов с ортогональной намагниченностью ($V_{орт}$) определяли с помощью авторской методики [1]. Знак константы магнитострикции (λ_s) определяли с помощью обработки поверхности ленты водой (ОВ). После термообработки при 250°С преимущественно плоские растягивающие напряжения, индуцированные внедренными в поверхность ленты атомами водорода и кислорода при ее взаимодействии с водой, повышают объем доменов с ортогональной намагниченностью. В то же время ориентированная поперек оси ленты псевдоодноосная компонента таких напряжений, индуцированная повышенной концентрацией внедренных атомов согласно теории направленного упорядочения, после отжига при 200°С вызывает переориентацию намагниченности в плоскости ленты вдоль ее оси. Это приводит к увеличению остроты магнитной текстуры η, определяемой отношением объемов доменов с планарной намагниченностью, ориентированной вдоль (V_{180}) и поперек (V_{90}) оси ленты (табл.1). Следовательно, в этом интервале температур сохраняется состояние ленты с $\lambda_s<0$.

Таблица 1. Магнитные характеристики ленты аморфного сплава Co-Ni-Fe-Cr-Mn-Si-B после термообработки на воздухе и последующей обработки водой

Состояние ленты	ТО 200°С, $\tau = 15$ мин			ТО 250°С, $\tau = 7$ мин		
Характеристики	μ_{max}	$V_{орт}$,%	$\eta = V_{180}/V_{90}$	μ_{max}	$V_{орт}$,%	$\eta = V_{180}/V_{90}$
ТО	17300	23.5	1.15	37000	35	0.40
ТО+ОВ	16800	23.8	1.35	34400	42	0.41

После термообработки при 180 – 250°С наблюдается резкое снижение μ_{max}, обусловленное увеличением $V_{орт}$ и уменьшением η в результате существенного вклада кристаллизации свободной поверхности ленты в формирование преимущественно плоских анизотропных растягивающих напряжений вдоль ее оси. Такие напряжения, индуцируемые анизотропным ростом кристаллов вдоль оси ленты, при 250°С уже приводит к формированию поперечной магнитной анизотропии в ее плоскости ($\eta<1$).

1. Н.А. Скулкина *и др.*, ФММ **118**, 1248 (2017).

Магнитные свойства соединений CoNi, FeNi, MnAl, MnGa

Д.В. Новокрещенов*, В.В. Соколовский

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
*e–mail: mavarleyne.chelgu@ya.ru

Магнитокристаллическая анизотропия (МА) – основная характеристика магнитных материалов, описывающая силу их магнитных свойств. Сплавы с высокой МА представляют большой интерес в качестве источников постоянного магнитного поля [1]. Задача поиска соединений, не содержащих редкоземельные элементы и обладающих приемлемыми магнитными свойствами, является крайне актуальной.

Цель данной работы — теоретическое исследование электронной структуры и магнитокристаллической анизотропии для серии бинарных соединений с учетом тетрагональных искажений ГЦК решётки [2]. Расчёты выполнены с помощью пакета SPR-KKR [3] при разных разбиениях **k**-пространства и ферромагнитном упорядочении с ориентацией магнитных моментов вдоль кристаллографических направлений [001] и [100]. Также рассчитаны плотности электронных состояний. В качестве примера на рис. 1 приведена зависимость энергии МА от плотности **k**-точек на атом неприведённой зоны Бриллюэна. Из неё ясно, что достаточная точность вычислений достигается при плотности **k**-точек более $7.7 \cdot 10^3$ на атом. Также на рис. 2 изображена плотность электронных состояний, которая своим видом отражает ферромагнитные свойства соединения. Подобные результаты получены и для других соединений. Можно полагать, что исследуемые соединения могут представлять интерес в качестве альтернативы редкоземельным магнитным сплавам.

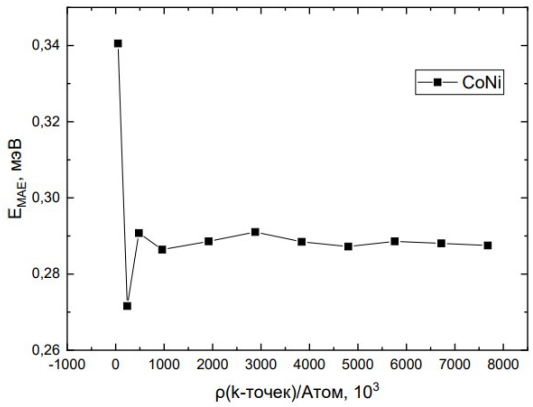


Рис. 1. Зависимость энергии МА для сплава CoNi от разбиения **k**-пространства, где ρ(**k**-точек) — плотность **k**-точек на атом неприводимой зоны Бриллюэна.

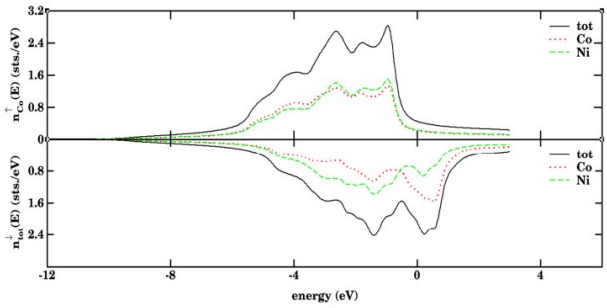


Рис. 2. Плотность электронных состояний соединения CoNi.

1. M D Kuz'min *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter. **26**, 064205 (2014).
2. Edström, A. *et al.*, Phys. Rev. B, **90**, 014402 (2014).
3. Ebert, H. *et al.*, Rep. Prog. Phys. **74**, 096501 (2011).

Спиновое состояние железа и спиновые переходы в интеркалированных и замещенных слоистых соединениях Fe_xTaCh_2 и $Fe_xTa_{1-x}Ch_2(Ch = S, Se)$

Н.М. Носова[1]*, Н.В. Селезнева[1], Н.В. Баранов[1,2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: toporova.natalia1402@mail.ru

Дихалькогениды переходных металлов TCh_2 (T — переходный металл, Ch = халькоген) представляют собой широкий класс слоистых материалов с разнообразными структурными и физическими свойствами. Внедрение в TCh_2 атомов $3d$-переходных металлов, обладающих магнитным моментом, приводит к появлению различных магнитных состояний и свойств, которые могут регулироваться концентрацией интеркаланта, выбором интеркалируемых частиц и исходной решеткой. Так, соединения $TaSe_2$ и TaS_2 со слоистой кристаллической структурой типа 2H обладают металлической проводимостью, обладают фазовыми переходами с образованием волны зарядовой плотности и в сверхпроводящее состояние [1], а интеркаляция атомов Fe между сэндвичами S–Ta–S приводит к в появлении в Fe_xTaS_2 ферромагнитного состояния при $x \sim 0.25$ с температурой Кюри T_C до 160 K, экстремально высокой коэрцитивной силой ($H_c \sim 37 - 55$ кЭ) и огромной магнитокристаллической анизотропией ($H_a \sim 600$ кЭ) при низких температурах [2]. Наряду с этим, замещенные соединения $Fe_xTa_{1-x}Ch_2$ до $x = 0.3$ не проявляют дальнего магнитного порядка [3]. Вместо этого в $Fe_xTa_{1-x}S_2$ обнаружено сверхпроводящее состояние при низком содержании Fe ($0 < x \leqslant 0.05$) [4], изолирующее поведение при $x \geqslant 0.1$ и переход из низкоспинового (LS) в высокоспиновое (HS) состояние [3] при повышении температуры в диапазоне 200−400 К. Эти данные показывают, что различное локальное окружение атомов Fe, внедренных в решетку $TaCh_2$ между сэндвичами Ch-Ta-Ch или внутри сэндвичей, существенно влияет на спин и электронное состояние Fe.

Одностадийным методом твердофазной реакции были синтезированы поликристаллические образцы $Fe_{0.25}TaCh_2$ и $Fe_xTa_{1-x}Ch_2$. Исследование кристаллической структуры показало, что все полученные соединения являются однофазными и обладают гексагональной симметрией с пространственными группами $P6_3/mmc$ и $P\text{-}3m1$, соответственно.

Установлено, что условия термообработки и охлаждения образцов $Fe_{0.25}TaS_2$ существенно влияют не только на их гистерезисные свойства, но и на температуру Кюри. Закаленный образец демонстрирует существенно сниженное значение T_C по сравнению с медленно охлажденным образцом, что можно объяснить различием в распределении атомов Fe в решетке. Возможно, это различие связано с частичным перемешиванием атомов тантала и железа при быстрой закалке, что приводит к размещению атомов железа как в слое тантала, так и в щели Ван-дер-Ваальса, где атомы Fe имеют разные спиновые состояния. Поведение магнитной восприимчивости $Ta_{0.9}Fe_{0.1}Se_2$ с температурой свидетельствует о том, что ниже $T \sim 250$ К ионы Fe имеют LS-состояние, а нагрев приводит к переходу в HS-состояние, что согласуется с литературными данными.

Работа подготовлена при финансовой поддержке ППК 3.1.1.1.г-20.

1. D. C. Freitas*et al.*, Phys. Rev. B **93**, 1184512 (2016).
2. Y.J. Choi *et al.*,Europhysics Letters **86**, 37012 (2009).
3. M. Eibschütz *et al.*, Phys. Rev. B **15**, 103 (1977).
4. M. L.J. Li *et al.*, Europhysics Letters B **97**, 67005 (2012).

Устойчивость магнитных скирмионов: исследование влияния размера от нанометров до микронов

М.Н. Поткина[1]*, И.С. Лобанов[1], Х. Йонссон[2]
[1]Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
[2]Исландский университет, Рейкьявик, Исландия
*e–mail: potkina.maria@yandex.ru

Скирмионы, антискирмионы и другие локализованные неколлинеарные магнитные структуры представляют перспективное направление для разработки нового поколения плотной, энергоэффективной и быстрой магнитной памяти, нейроморфных систем и других спинтронных устройств [1]. Фундаментальной проблемой для таких практических приложений является устойчивость магнитных состояний по отношению к тепловым флуктуациям и случайным внешним воздействиям. На данный момент было проведено несколько исследований влияния размера и формы скирмионов в тонких ферромагнитных пленках на устойчивость скирмионов [2, 3]. Из этих исследований ясно, что как размер, так и форма скирмионов значительно влияют на время жизни скирмиона. Для того, чтобы разделить эти два эффекта, нами было проведено систематическое исследование влияния размера скирмиона на время жизни при сохранении его формы. Расчеты времени жизни были проведены в рамках гармонического приближения теории переходного состояния для магнитных степеней свободы [4]. Было получено, что при переходе от нанометрового к микронному размеру скирмиона предэкспоненциальный фактор в законе Аррениуса для частоты распада скирмиона уменьшается на четыре порядка, в то время как энергия активации увеличивается и приближается к верхней границе, согласующейся с энергией солитона Белавина-Полякова [5]. В результате время жизни увеличивается на несколько порядков: с менее чем микросекунды до нескольких секунд при комнатной температуре и до недель при температуре 200 К.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-00059, https://rscf.ru/project/22-72-00059/.

1. R. Wiesendanger, Nat. Rev. Mat. **1**, 16044 (2016).
2. A. S. Varentsova *et al.*, Phys., Chem., Math. **9**, 356 (2018).
3. A. S. Varentsova *et al.*, npj Comput. Matet. **6**, 193 (2020).
4. P. F. Bessarab *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 184409 (2012).
5. A. A. Belavin and A. M. Polyakov, Sov. Phys. JETP Lett.**22**, 245 (1975).

Характер межслойных связей в двумерных материалах

Г.В. Пушкарев[1]*, В.Г. Мазуренко[1], В.В. Мазуренко[1], Д.В. Бухвалов[1,2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Нанкинский лесной университет, Нанкин, Цзянсу, Китай
*e–mail: puskarev.g.v@gmail.com

Двумерные ($2D$) и квазидвумерные материалы (Ван-дер-Ваальсовы системы VdW) привлекают большое внимание научного мира последнее десятилетие. Данные, полученные в опубликованных эксперементальных[1] и теоретических[2] работах, свидетельствуют о важности качества и количества слоев подложки, поскольку они оказывают сильное воздействие на свойства двумерных и квазидвумерных материалов. Данный факт свидетельствует о необходимости исследования влияния межслойных взаимодействий в данных системах.

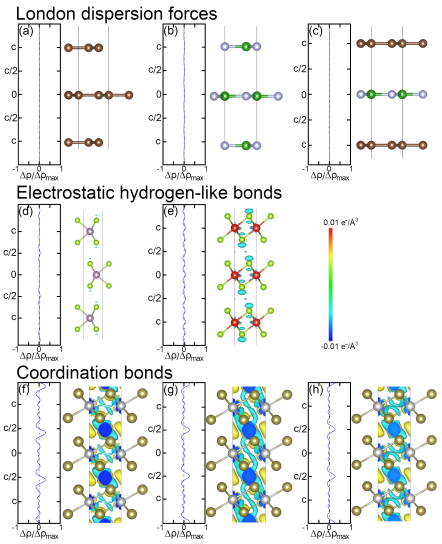


Рис. 1. Объемное и проинтегрированное вдоль оси представления изменений плотности заряда

В нашей работе мы исследовали прочность межслойных связей рассматривая изменения распределения зарядовой плотности при переходе от объемной фазы матерала к $2D$(VdW). Нами были рассмотрены следующие представители 2D(VdW): графен (рис. 1a), hBN (рис. 1b),гетероструктура из графена и hBN (рис. 1c), $MoSe_2$ (рис. 1d) VSe_2 (рис. 1e) и дителуриды $NiTe_2$, $PdTe_2$, $PtTe_2$ (рис. 1f,g,h). В качестве метода расчета мы использовали теорию функционала плотности (DFT), имплементированную в программном комлексе VASP [3]. Для оценки перераспределения зарядовой плотности использовалась формула:

$$\Delta\rho = \rho_{\text{bulk}} - \sum_{i}^{n} \rho_i, \tag{1}$$

где ρ_{bulk} соответствует электронной плотности сверхячейки, имеющей периодические граничные условия и содержащей n слоев, представляющих собой объемный кристалл. В свою очередь, ρ_i представляет собой электронную плотность i-го монослоя, рассчитанную в рамках той же сверхячейки, но с изоляцией расчитываемого слоя от остальных. На рис. 1 изображены изменения зарядовых плотностей: в объемном виде и проинтегрированные на плоскостях параллельных слою материала. Проинтегрированные плотности представлены в относительных единицах $\Delta\rho_{max} = 1.6 \times 10^{-2}$ зарядов e^- на ангстрем. Результаты, полученные в наших расчетах, позволяют выделить три типа межслойных связей. Слабые $\Delta\rho \approx 0$ (рис. 1a,b,c), отвечающие дисперсионным силам. Средние с перераспределением между слоями (рис. 1d,e), отвечающие электростатическим силам. Сильные с существенным перераспределением (рис. 1f,g,h), координационным силам.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 21-72-10136

1. M. Z. Hossain *et al.*,Nature Chemistry **4**, 305–309 (2012).
2. D. W. Boukhvalov, Nanotechnology **22**, 055708 (2011).
3. G. Kresse and uller J. Furthm Phys. Rev. B **54(16)**, 11169–11186 (1996).

Структурные и магнитные свойства пленок Co/X/Co(X = W, Gd)

А.С. Русалина*, А.В. Свалов, Г.В. Курляндская

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

*e–mail: anastasia.rusalina@urfu.me

Многослойные пленочные магнитные структуры являются основой магнитных носителей информации, магнитных записывающих головок и магнитных сенсоров [1]. Особенности процессов перемагничивания таких структур во многом определяются взаимодействием между магнитными слоями, характер и интенсивность которого зависит от материала и толщины прослойки [2].

В работе представлены результаты исследований трехслойных пленок Co/X/Co (X = W, Gd), осажденных на стеклянные подложи методом высокочастотного ионно-плазменного распыления. Толщина слов Co составляла 7 нм, толщина прослоек W и Gd (L_{sp}) изменялась в интервале от 0.1 нм до 4.8 нм. Осаждение образцов проводилось в присутствии постоянного магнитного поля, ориентированного в плоскости подложки. Рентгенографические исследования образцов были выполнены с помощью дифрактометра D8-Advance. Магнитные измерения проведены с использованием вибрационного магнитометра и магнитооптического Керр-микроскопа Evico.

Рентгеноструктурный анализ показал, что все образцы обладают высокой степенью текстуры. В слоях Co могут присутствовать как кубическая, так и гексагональная фазы. Средний размер кристаллитов в слоях Co равен 5 нм.

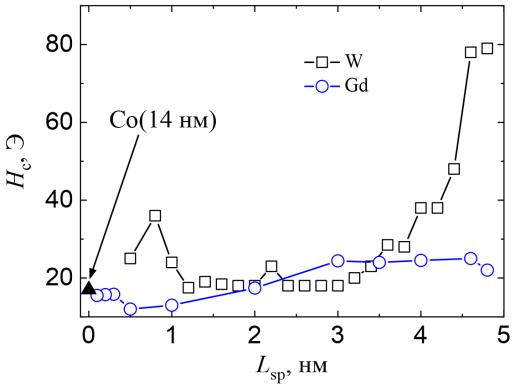


Рис. 1. Зависимость коэрцитивной силы пленок Co/X/Co от толщины прослойки

Однослойные пленки Co толщиной 7 нм и 14 нм характеризовались одноосной магнитной анизотропией в плоскости образца, ось легкого намагничивания которой совпадала с осью приложения магнитного поля, присутствовавшего во время напыления. Вид и параметры петель гистерезиса, изображения доменной структуры свидетельствуют о различном влиянии материала прослоек на магнитные свойства пленок Co/X/Co (см., например, рис. 1). В частности, петли гистерезиса, измеренные вдоль и перпендикулярно оси легкого намагничивания, для пленок Co/W/Co свидетельствуют о постепенной потере результирующей анизотропии в плоскости образца при $L_W \gtrsim 4$ нм, в то время как пленки Co/Gd/Co остаются магнитоанизотропными во всем диапазоне толщин Gd. В работе рассматриваются возможные причины, определяющие особенности межслойного взаимодействия слоев Co, в том числе, образование областей переменного химического состава в результате взаимной диффузии на границе слоев Co и прослоек, изменение структурного состояния прослоек при увеличении их толщины.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-00980, https://rscf.ru/project/22-29-00980/.

1. V.K. Joshi, Eng. Sci. Technol. an Int. J. **19**, 1503 (2016).

2. A. Hirohata *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **509**, 166711 (2020).

Магнитокристаллическая анизотропия сплавов Гейслера на основе Co – Ni – Z

А.А. Саносян*, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
*e–mail: arthursanosyan@mail.ru

Функциональные сплавы Гейслера на основе Co являются перспективными с точки зрения создания постоянных магнитов [1] в силу их низкой стоимости и конкурентоспособности с современными постоянными магнитами на редкоземельных элементах, таких как (Dy, Nd) [2]. В связи с этим перед фундаментальной наукой стоит задача поиска новых высокоэнергетических соединений без редкоземельных магнитотвердых материалов. Их уникальность объясняется высокими показателями намагниченности и магнитной анизотропии, благодаря сильному спин-орбитальному взаимодействию.

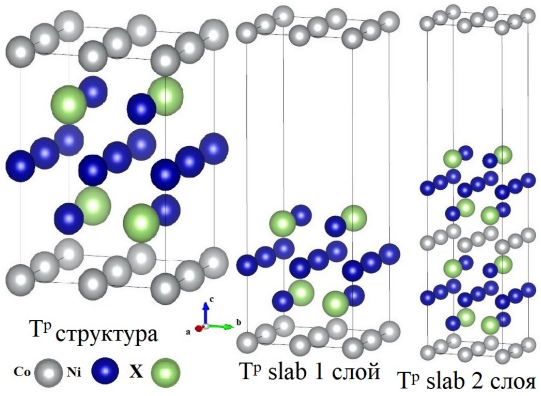


Рис. 1. Тонкопленочные структуры различной толщины (Slab) на основе T^p структуры [3]

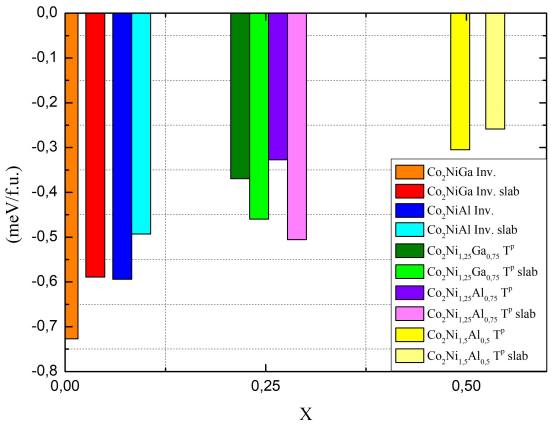


Рис. 2. Энергия магнитокристаллической анизотропии ($E_{\text{MAE}} = E_{100} - E_{001}$) для массивной и тонкопленочной структур соединений $Co_2Ni_{1+x}Z_{1-x}$ (Z = Al, Ga)

В данной работе рассмотрены сплавы Гейслера семейства $Co_2Ni_{1+x}Z_{1-x}$ (Z = Al, Ga). Исследования из первых принципов выполнены с помощью пакета VASP. Расчеты магнитных и структурных свойств проведены для суперячейки, состоящей из 16 атомов, в приближении обобщенного градиента электронной плотности (GGA-PBE). Рассмотрены две тетрагональные структуры: инверсионная (Inv.) и с послойным упорядочением (T^p) [3], на базе которых также смоделированы тонкопленочные структуры различной толщины (Slab) (рис.1.). Для каждой композиции в соответствующих структурах рассчитана энергия магнитокристаллической анизотропии (рис. 2.). По полученным данным видно, что наибольшая анизотропия для тонкопленочной структуры относительно обычной T^p преобладает образцах при концентрации $x = 0.25$.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания № 075-01391-22-00.

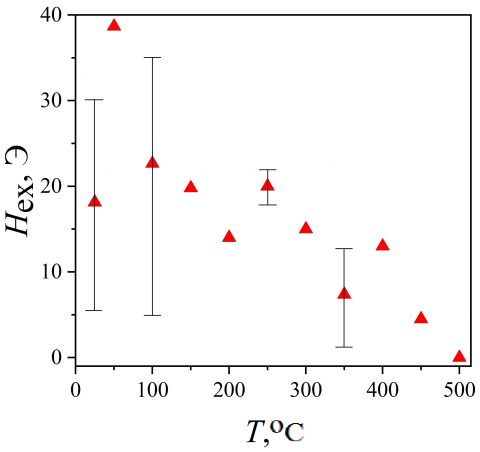
1. Y. Matsushita *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **50**, 095002 (2017).
2. K. Skokov and O. Gutfleisch, Scr. Mater. **154**, 289 (2018).
3. V. Sokolovskiy *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **546**, 168728 (2022).

Влияние температуры подложки на эффект обменного смещения в пленках $Ta/Cr_{70}Mn_{30}/Fe_{20}Ni_{80}/Ta$

С.В. Северова*, А.А. Фещенко, М.Е. Москалев, В.Н. Лепаловский, А.Н. Горьковенко, В.О. Васьковский

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: severova.sveta.severova@yandex.ru

С появлением спинтроники усилился интерес к слоистым плёночным материалам, обладающим внутренним магнитным смещением, которое состоит в сдвиге петли гистерезиса ферромагнитного слоя по оси магнитного поля за счёт его обменной связи с антиферромагнитным слоем [1]. Сплав Cr-Mn относится к числу антиферромагнетиков потенциально пригодных для использования в таких структурах [2]. Согласно имеющимся данным обменное смещение (закрепление) в многослойных плёнках на основе Cr-Mn возникает только при относительно больших толщинах ($L > 40$ нм) антиферромагнитного слоя и показывает значительную нестабильность в реализации. Это может быть следствием невысокой магнитной анизотропии антиферромагнитных кристаллитов, которая, в свою очередь, связана с их малыми размерами. Одним из факторов, влияющих на микроструктуру поликристаллических плёнок, является температура подложки, на которую осаждается сублимированный материал. Данная работа ориентирована на поиск путей усиления «закрепляющего» действия антиферромагнитного слоя и посвящена исследованию влияния температуры подложки на гистерезисные свойства пленок типа (Cr-Mn)/(FeNi).



Образцы для исследования представляли собой многослойные плёнки Ta(5 нм)/$Cr_{70}Mn_{30}$(50 нм)/$Fe_{20}Ni_{80}$(10 нм)/Ta(5 нм) и были получены методом магнетронного распыления на покровных стёклах Corning. Состав и толщина антиферромагнитного слоя были выбраны на основе предварительных экспериментов. Температура нагрева подложки T_a варьировалась в интервале $20 \div 500$ °C. Структурная аттестация образцов выполнялась на дифрактометре D8 ADVANCE. Для измерения магнитных свойств полученных пленок использовался керровский магнитометр EvicoMagnetics. На рисунке приведена усреднённая зависимость поля смещения центра петли гистерезиса (поле обменного смещения) слоя пермаллоя H_{ex} от температуры подложки, построенная по результатам трёхкратного повторения эксперимента. Вертикальными отрезками указаны диапазоны отклонения величины H_{ex} от средних значений. Видно, что в области $T_a \leqslant 250$°C поле обменного смещения в среднем сохраняется на уровне 20 Э, но разброс его значений уменьшается с усилением термического воздействия. Область $T_a > 250$°C характеризуется монотонным снижением H_{ex}. В работе с привлечением данных по магнитному гистерезису и дифрактометрии анализируются причины установленных закономерностей.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РНФ, проект № 22-22-00814.

1. K. O'Grady *et al.*, J. Appl. Phys. **128**, 040901 (2020).
2. W. Feng. *et al.*, J. Appli. Phys. **108**, 073915 (2010).
3. С.В. Северова и др., ФТИ-2022. 322, (2020).

Новые парамагнитные центры в ионно-имплантированных керамиках $MgAl_2O_4 : C$

Л.В. Ситдиков[1]*, А.Ф. Зацепин[1], А.Н. Киряков[1], Ю.В. Щапова[1,2], Д.Р. Байтимиров[1], С.Ф. Конев[1], Н.В. Гаврилов[3]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт геологии и геохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: cosleom2@ya.ru

Оптические керамики $MgAl_2O_4$ являются перспективными функциональными материалами, представляющими интерес в качестве матрицы для роста в приповерхностном слое ионо-индуцированных низкоразмерных структур. Повышенная радиационная стойкость и широкое окно оптической прозрачности (0.2−6 мкм) открывают возможности для радиационной модификации приповерхностного слоя керамик $MgAl_2O_4$ при повышенных дозовых нагрузках. Цель настоящей работы заключалась в модификации и анализе парамагнитных свойств прозрачной керамики $MgAl_2O_4$ имплантированной импульсным пучком C^+ с энергией 30 кэВ.

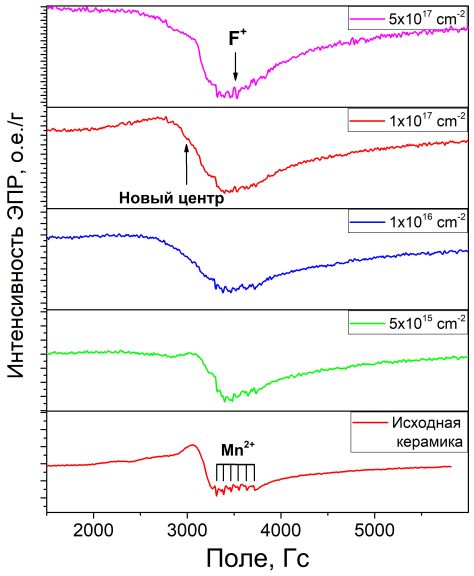


Рис. 1. Спектры ЭПР исходного (снизу) и имплантированных углеродом керамик $MgAl_2O_4$. Рост дозы имплантации представлен снизу-вверх. Сигнал ЭПР нормирован на массу образцов.

В качестве мишени для имплантации использовались оптические керамики $MgAl_2O_4$, синтезированные методом горячего одноосного прессования нанопорошка. Имплантация выполнена импульсным ионным пучком углерода с энергией 30 кэВ в диапазоне доз $F = 5 \times 10^{15} - 5 \times 10^{17}$ см$^{-2}$. Спектры ЭПР зарегистрированы с помощью спектрометра ELEXSYS 580 (Bruker).

В результате ионной имплантации в ЭПР спектре формируется ряд сигналов, интенсивность которых зависит от дозы имплантации, рисунок 1.

При дозах выше $F \geqslant 10^{17}$ см$^{-2}$ в спектрах ЭПР ионно-имплантированных керамик наблюдается сигнал F^+ центров, с g-фактором 2.004 и полушириной 31 Гс. Для анализа изменения концентрации центров F типа в имплантированных участках мы дополнительно оценили отношение сигнала сверхтонкой структуры иона Mn^{2+} к сигналам F^+ центров в ЭПР спектрах. Обнаружено, что происходит общий рост F-типа, что в свою очередь запускает процессы нуклеации примесных ионов, что стимулирует рост кластеров. Процесс роста кластера рассматривается нами исходя из концепции «сложность» и подразумевает следующие этапы роста кластера: 1) итерация стока заряженных ионов к нейтральным кластерам, что приводит к зарядке последних; 2) итерация компенсации заряда электроном, что позволяет снять кулоновское отталкивание и присоединить очередной заряженный ион.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030».

Кристаллическая структура и магнитные свойства смешанновалентного комплекса $LiMn^{2+}Mn^{3+}TeO_6$

А.Е. Суслопарова*[1,2], А.И. Курбаков[1]

[1]Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

[2]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

*e–mail: susloparovanna@mail.ru

Исследуемое в работе соединение $LiMn_2TeO_6$ принадлежит к обширному классу сложных оксидов $LiMM'XO_6$ (X = Sb, Te), интересному для исследования из-за необычной кристаллической структуры, физических и химических свойств. В частности, у соединения неожиданно низкая электропроводимость [1], что, в сочетании с антиферромагнитным типом упорядочения, может быть предпосылкой для эффекта колоссального магнетосопротивления.

В изучаемой системе валентности марганца между 2+ и 3+ ионные радиусы отличаются достаточно, чтобы ионы были валентно локализованы. В отличие от степени окисления между 3+ и 4+, где ионы разных валентностей часто занимают одну и ту же кристаллографическую позицию из-за сходства ионных радиусов. [2] Физика этих систем из-за наличия конкурирующих взаимодействий, фрустрации, взаимодействия квантовых и тепловых флуктуаций намного сложнее и интереснее, чем физика простых твердых тел. Это приводит к тому, что подобная модификация может эффективно изменять электрические и магнитные свойства.

Кристаллическая структура была получена в режиме высокого разрешения на порошковом дифрактометре высокого разрешения D2B, *Institut Laue–Langevin* (ILL), Франция.

Структура $LiMn_2TeO_6$ соответствует пространственной группе низшей сингонии P1, параметры элементарной ячейки $a = 5.0956(1)$, $b = 8.5566(2)$, $c = 5.0405(1)$, $\alpha = 92.651(2)$, $\beta = 92.145(2)$, $\gamma = 89.766(2)$. В основе структуры лежит сильно искаженная двухслойная плотная упаковка анионов кислорода с Mn и Te, занимающими половину октаэдрических пустот. Li_1 и Li_2 сильно смещены от центра вдоль оси c и находятся на грани тетраэдра.

Составленные на основе различных измерений макромагнитных свойств магнитные фазовые диаграммы показывают богатое разнообразие реализующихся типов упорядочения и магнитных фазовых переходов.

Для исследования магнитной структуры и её модификаций в ILL проведены нейтронные измерения при нескольких температурах выше и ниже температуры Нееля. Ниже 20 К появляются дополнительные рефлексы, занимающие позиции до первых ядерных. Характер возникновения дополнительного рассеяния указывает на реализацию в системе антиферромагнитного типа упорядочения. При этом, ниже 13 К происходит резкое изменение магнитной части нейтронограммы, что связано, предположительно, с переходом от несоизмеримой магнитной структуры к соизмеримой с ядерной.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 18-12-00375

1. A.A. Pospelov *et al.*, Solid State Sciences. **13**, 1931 (2011).

2. T.C. Stamatatos, G. Christou, Phil. Trans. R. Soc. A **366**, 113 (2008).

Структурные особенности и электрические свойства пленок $Ta/Cr_{100-x}Mn_x/Ta$

А.А. Фещенко[1]*, М.Е. Москалев[1], В.Н. Лепаловский[1], А.Н. Горьковенко[1], Е.А. Кравцов[1,2], В.О. Васьковский[1,2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: a.a.feshchenko@urfu.ru

Долгое время антиферромагнетики использовались исключительно как вспомогательные слои в многослойных структурах, обеспечивая в прилежащих ферромагнитных слоях закрепление магнитного момента [1]. Лишь в последние несколько лет антиферромагнетики стали рассматриваться как самостоятельные среды для спинтроники. Одним из антиферромагнитных сплавов, отличающийся высокой температурой Нееля в массивном состоянии, являются сплавы Cr-Mn [2]. Свойства сплавов, особенно в тонкопленочном состоянии, во многом зависят от их кристаллической структуры. Данная работа посвящена исследованию структурных свойств пленок $Ta/Cr_{100-x}Mn_x/Ta$.

Исследуемые пленочные образцы были получены методом магнетронного распыления однокомпонентных мишеней Ta, Cr, и Mn. Подложками служили покровные стекла *Corning*, покрытые буферным слоем Ta, толщиной 5 нм. Толщина антиферромагнитного слоя составляла 50 нм. Для исследования магнитных и электрических свойств пленок использовался измерительный комплекс LakeShore VSM 7407. Для аттестации структурного состояния плёнок использовался рентгеновский дифрактометр PANalytical Empyrean series 2.

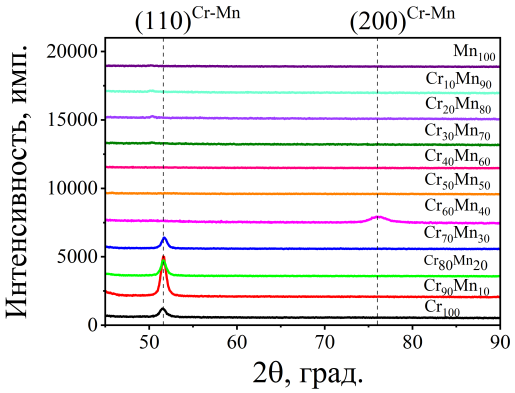


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы пленок $Ta/Cr_{100-x}Mn_x/Ta$, полученные в геометрии $\theta/2\theta$, в излучении Co K_α

На рисунке 1 представлены дифрактограммы пленок $Ta/Cr_{100-x}Mn_x/Ta$. Структурные исследования показали, что все образцы являются нанокристаллическими. В области составов $x \leqslant 50$ реализуется объёмно-центрированная кубическая (ОЦК) структура, причем для пленок с малым содержанием Mn ($x < 40$) характерна текстура типа (110). В образце $Ta/Cr_{60}Mn_{40}/Ta$ сформировалось текстура типа (200). В области составов $x \geqslant 50$ кристаллическая текстура в стандартной геометрии $\theta/2\theta$ отсутствует. Однако исследование в геометрии скользящего падения первичного пучка позволяет выявить пики, которые могут быть идентифицированы как (110) ОЦК фазы δ-Mn, так и (111) гранецентрированной кубической (ГЦК) фазы γ-Mn. Косвенно, определить кристаллическую структуру можно путем анализа зависимостей электросопротивление от температуры, поскольку известно, что γ-Mn является антиферромагнетиком с температурой Нееля выше комнатной. В докладе будет представлен более детальный анализ получившихся зависимостей.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект №22-22-00814

1. K. O'Grady *et al.*, J. Appl. Phys. **128**, 040901 (2020).
2. S. Maki, K. Adachi, Journal of the Physical Society of Japan.**46**, 1131 – 1137 (1979).

Влияние долговременного воздействия циклических полей на магнитные свойства сплава Ni – Mn – In

Л.Н. Ханов[1]*, А.М. Алиев[1], А.В. Маширов[2], А.П. Каманцев[2]

[1]Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
[2]Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
*e–mail: hanov82@mail.ru

Для использования, в качестве рабочего тела в технологии магнитного охлаждения, одним из основных требований является то, что материал должен обладать гигантской величиной магнитокалорического эффекта (МКЭ) в области комнатных температур. В сущности, это требование можно дополнить требованием стабильности магнитокалорических свойств в условиях долговременного воздействия циклических магнитных полей. Исследования в циклических магнитных полях позволяют создать условия близкие к работе магнитных холодильников. Большинство перспективных материалов для использования в технологии магнитного охлаждения — это материалы с магнитоструктурными фазовыми переходами первого рода. Одними из таких материалов считаются сплавы Гейслера, в которых наблюдаются ряд магнитных и структурных фазовых переходов, часто эти переходы связаны [1-2]. Несмотря на активные исследования магнитных свойств, остается много вопросов относительно магнитокалорических свойств данных материалов. В частности, каково влияние длительного воздействия циклического магнитного поля на магнитные свойства, проблема оценки вкладов магнитной и решеточной подсистем в общий МКЭ в различных сплавах Гейслера.

В данной работе представлены результаты исследования магнитных и тепловых свойств сплава Гейслера $Ni_{43.18}Mn_{45.15}In_{11.67}$: измерения температурной и полевой зависимостей МКЭ и магнитострикции в циклических магнитных полях до 8 Тл и температурной зависимости теплового расширения в постоянном магнитном поле до 8 Тл в интервале температур 77 – 350 K. Проведены также исследования влияние долговременного воздействия циклических полей на магнитные свойства сплава $Ni_{43.18}Mn_{45.15}In_{11.67}$ в области магнитоструктурного фазового перехода первого рода.

Для исследования магнитокалорических свойств в циклических магнитных полях был использован модуляционный метод [3]. Измерение теплового расширения и магнитострикции проводились тензометрическим методом [4].

По результатам экспериментального исследования магнитных свойств было обнаружено, что долговременное воздействие циклического магнитного поля приводит к уменьшению величины как МКЭ, так и магнитострикции в области магнитоструктурного перехода мартенсит - аустенит. По результатам полевой зависимости МКЭ и магнитострикции сделана оценка магнитного и решеточного вклада, которая показывает, что доминирующий вклад в общий МКЭ вносит решеточная составляющая.

1. J. Liu *et al.*, Nature Materials **11**, 620 (2012).
2. V D.Buchelnikov*et al.*, J. Magn. Magn. Mater.**320**, e175 (2008).
3. A.M.Aliev, Direct magnetocaloric effect measurement technique in alternating magnetic fields. arXiv:1409.6898 (2014).
4. С.И. Новикова, Тепловое расширение твердых тел. -М. Наука (1974).

Влияние межзеренного обменного взаимодействия на обратимую магнитную восприимчивость нанокристаллических сплавов Nd – Fe – B

А.Н. Шалагинов*, С.В. Андреев, В.Е. Мальцева, А.А. Голубятникова, А.С. Волегов
Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: arkady.shalaginov@urfu.me

Магнитотвердые материалы в нанокристаллическом состоянии имеют большее значение коэрцитивной силы при одинаковых химических составах по сравнению с микрокристаллическими. Однако в нанокристаллических материалах велика доля поверхностных и приповерхностных ионов. Сильное обменное взаимодействие между соседними кристаллитами позволяет доменной границе переходить между ними, что негативно сказывается на величине коэрцитивной силы сплава. Магнитная изоляция зерен позволяет увеличивать коэрцитивную силу в несколько раз. Такая задача решается путем зерноганичной инфильтрации легкоплавкой добавки Nd-Cu между зерен магнитотвердого сплава на основе Nd-Fe-B.

Степень магнитной изоляции зерен можно оценивать на основании исследования магнитной восприимчивости в разных магнитных состояниях. На рисунке 1 представлены зависимости обратимой магнитной восприимчивости после приложения размагничивающего поля к предварительно намагниченному до состояния технического насыщения образцу.

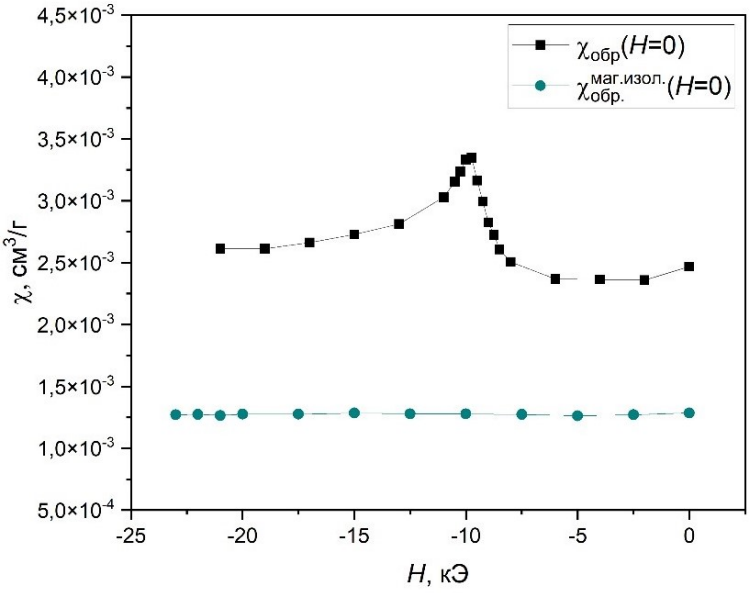


Рис. 1. Обратимые магнитные восприимчивости сплавов марки MQP-B без магнитной изоляции и с магнитной изоляцией

Зависимость $\chi_{\text{обр}}(H = 0)$ исходного сплава имеет пик вблизи размагничивающего поля, равного коэрцитивной силе. Причина появления пика связана с формированием микромагнитных неоднородностей на границах зерен. Аналогичная зависимость сплава после инфильтрации не имеет никаких особенностей ввиду обменной изоляции зерен.

Анализ приведенных зависимостей будет представлен в докладе.

Эффективная магнитная модель для описания монослоя Fe_3GeTe_2

И.А. Яковлев*, Г.В. Пушкарев, Д.И. Бадртдинов, В.Г. Мазуренко, В.В. Мазуренко, А.Н. Руденко
Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: iakovlev.ilia@mail.ru

Монослой Fe_3GeTe_2 является одним из ярких примеров двумерных вандерваальсовых систем, в которых, вопреки теореме Мермина-Вагнера, реализуется дальний магнитный порядок [1], что объясняется наличием в системе анизотропии. Так как данное соединение является металлом, для корректного моделирования его свойств требуется учет обменных взаимодействий из большого числа координационных сфер, что, в свою очередь, сопряжено с серьезными вычислительными затратами. При помощи средств теории функционала электронной плотности (DFT), реализованных в программном комплексе Vienna ab initio simulation package (VASP) [2] нами была проведена оценка обменных интегралов в рассматриваемой системе в рамках модели Гейзенберга. Исходя из результатов Монте-Карло симуляций, осуществленных в пакете UppASD [3], было установлено, что реальная кристаллическая решетка, содержащая три атома в элементарной ячейке, может быть эффективно заменена решеткой пчелиных сот, как это представлено на рис. 1. Это происходит благодаря сильному ферромагнитному взаимодействию J ∼ 120 мэВ между парой вертикально расположенных атомов железа, заставляющему их магнитные моменты вести себя как единое целое. Данная замена позволяет значительно ускорить вычисления. Кроме этого, нами были расчитаны температуры Кюри в приближении случайных фаз (RPA) в зависимости от радиуса последней координационной сферы, включенной в гамильтониан модели (рис. 1). Значение $T_c \sim 137$ K, к которому стремится получаемая зависимость при увеличении учитываемого числа взаимодействий, находится в хорошем согласии с экспериментом $T_c \sim 130$ K [4].

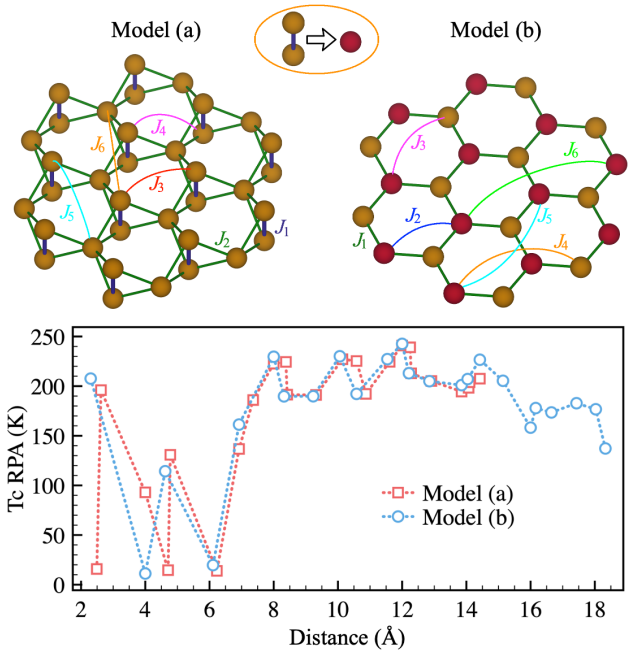


Рис. 1. Схематичное изображение полной и эффективной магнитных моделей монослоя Fe_3GeTe_2 и график зависимости температуры Кюри от расстояния, в пределах которого идет учет взаимодействий.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-72-10136.

1. Y. Deng *et al.*, Nature **563**, 94 (2018).
2. G. Kresse, J. Furthmüller, Physical Review B **54**, 11169 (1996).
3. O. Eriksson *et al.*, Atomistic Spin Dynamics: Foundations and Applications, Oxford University Press (2017).
4. Z. Fei *et al.*, Nature Materials **17**, 778 (2018)

Фазовые переходы и критические явления

Влияние замещений в катионной и анионной подрешетках Co_7Se_8 на физические свойства

Д.Ф. Акрамов[1,2*], Н.В. Селезнева[1], Д.К. Кузнецов[1], Н.В. Баранов[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: akramov.danil@urfu.ru

В проведенных раннее исследованиях [1] было показано, что в системе $(Co_{1-x}Fe_x)_7Se_8$ замещение в катионной подрешетке приводит к незначительному изменению параметра a и расширению решетки вдоль оси c при увеличении концентрации железа. При этом наблюдается появление дальнего магнитного порядка при концентрациях железа $x \geqslant 0.4$ и рост среднего магнитного момента на атом переходного металла. Несмотря на то, что соединения M_7X_8 (M = Fe, Co; X = S, Se) изоструктурны и элементы триады железа (Fe, Co, Ni) являются ферримагнетиками, соединение Co_7Se_8 в отличие от ферримагнитного Fe_7Se_8 не обладает дальним магнитным порядком и является парамагнетиком Паули [2]. Поскольку теллур обладает большим ионным радиусом по сравнению с селеном, то замещение селена теллуром в соединении Co_7Se_8 также должно приводить к росту параметров элементарной ячейки и возможному изменению магнитных и транспортных свойств. В связи с этим представляет особый интерес выяснение роли замещения в анионной подрешетке на физические свойства соединений $Co_7(Se_{1-y}Te_y)_8$ и проведение сравнительного анализа с данными, полученными для системы $(Co_{1-x}Fe_x)_7Se_8$.

В ходе работы был синтезирован ряд поликристаллических образцов $Co_7(Se_{1-y}Te_y)_8$ методом твердофазного ампульного синтеза в вакуумированных кварцевых ампулах по одностадийной методике. Рентгенографическая аттестация образцов осуществлялась на дифрактометре `Bruker D8 ADVANCE`. Исследование химического состава и морфологии образцов с помощью сканирующей электронной микроскопией Auriga (Carl Zeiss, Германия).

Установлено, что все полученные соединения системы $Co_7(Se_{1-y}Te_y)_8$ кристаллизуются в гексагональной структуре типа NiAs. Анализ рентгенографических данных показал, что замещение селена на теллур сопровождается изменением симметрии кристаллической структуры; так при увеличении концентрации теллура до $y \sim 0.3$ происходит переход от структуры описываемой пространственной группой $P3_121$ к структуре $P6_3/mmc$, а при достижении $y = 1$ кристаллизация соединения происходит в пространственной группе $P-3m1$. Оказалось, что замещение селена теллуром приводит к анизотропному изменению параметров элементарной решетки. Значительный рост межатомных расстояний наблюдается в базисной плоскости, в то время как параметр c, характеризующий среднее межплоскостное расстояние изменяется незначительно, тогда как при замещении кобальта железом в системе $(Co_{1-x}Fe_x)_7Se_8$ наблюдалась обратная ситуация [1] несмотря на то, что объем элементарной ячейки в обеих системах растет с увеличением концентрации замещающих элементов. Установлено, что при замещении в анионной подрешетке наблюдается падение отношения параметров кристаллической решетки c/a, т.е. увеличение деформации анионного октаэдра, связано с большой поляризуемостью атомов теллура и увеличением степени ковалентности. В случае катионного замещения происходит рост отношения c/a и стремление к идеальному $c/a = 1.633$, по-видимому, из-за большего ионного радиуса атомов железа, находящегося в высокоспиновом состоянии и замещающего атомы кобальта, находящиеся в низкоспиновом состоянии.

Работа подготовлена при финансовой поддержке ППК 3.1.1.1.г-20.

1. N.V. Baranov *et al.*, Journal of Physics: Condensed Matter **27**, 286003 (2015).
2. V.L. Miller *et al.*, Journal of Solid State Chemistry **178**, 1508 (2005).

Анализ предпереходных явлений в сплавах систем Ni – Mn, Ni – Mn – Ti, Ni – Mn – Al, Ni – Mn – Ga

Е.С. Белослудцева[1,2*], В.Г. Пушин[1,2], В.Ю. Стукалов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: ebelosludceva@mail.ru

В настоящей работе впервые выполнили исследования предпереходных (предмартенситное, предаустенитное) состояний в метастабильных сплавах системы NiMn с термоупругими мартенситными превращениями (ТМП), легированных Ti, Al и Ga. Показано, что предпереходное состояние характеризуется относительным нарастанием амплитуды аномальных по температурной зависимости динамических и квазистатических смещений атомов, существенно отличающихся от характера атомных колебаний в обычных, не испытывающих МП металлических сплавах. В результате таких колебаний на микроэлектонограммах визуализируются диффузные эффекты в виде тяжей и сателлитов. Диффузные эффекты возникают за $100-150^{\circ}$ перед началом МП и при охлаждении (приближении к температуре начала МП, M_s) их интенсивность и четкость особенно усиливается на тяжах типа $<110>^*$ и $<112>^*$ в положениях, близких $1/3<110>^*$, $1/2<110>^*$, $1/3<112>^*$, $1/6<110>^*$ [1].

Анализ показывает, что типичные особенности наблюдаемого дифракционного твидового контраста и диффузного рассеяния электронов, т.е. их периодическое «повторение», позволяют описать их определенными спектрами поперечных и продольных волн колебаний в k-пространстве обратной решетки, которые характеризуются волнвыми (k) и поляризационными ($e^{(k)}$) векторами и, соответственно, отождествить их с локализованными волнами атомных смещений в пространстве кристалла, которые периодически искажают исходную кристаллическую решетку. Экспериментально выделяются два этапа в непрерывно нарастающих внутри B2-фазы предпереходных структурных изменениях. Первый — начало развития предмартенситного состояния при снижении устойчивости B2-решетки, характеризуемое возникновением ближнего порядка смещений атомов (БПС). При этом, рентгенодифрактометрически, начиная с определенной температуры ($T_{БПС}$), наблюдалось падение интенсивности линии 110_{B2}. При дальнейшем охлаждении происходит формирование промежуточных структур сдвига (ПСС), приводящее к уширению линии 110_{B2} ($T_{ПСС}$) и уже затем, начинается собственно ТМП ниже температуры M_s. Эти три состояния в сплавах разделены по температуре. В соответствии с полученными данными в предмартенситном состоянии аустенит исследованных сплавов может быть описан ближним порядком атомных смещений по типу будущих мартенситных фаз в основном посредством коррелированных и сдвиговых смещений по системе $\{101\}<101>$ОЦК с образованием локализованных сдвиговых наноструктур различной периодичности, приближающейся к структуре мартенситных фаз (2M, 10M, 14M).

Работа выполнена в рамках Госзадания (шифр «Структура») г.р. № 122021000033-2.

1. В.Г. Пушин *и др.*, Предпереходные явления и мартенситные превращения. — Екатеринбург: УрО РАН (1998).

Моделирование критического поведения однородной и неупорядоченной трехмерной модели Изинга

В.В. Бражник
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия
e–mail: brazhnik_valeriya@mail.ru

Изучение фазовых переходов и критических явлений является актуальной задачей статистической физики и физики конденсированного состояния [1]. Исследования процессов, происходящих в точке фазового перехода, проводятся в настоящее время с применением различных непертурбативных методов ввиду наличия широкомасштабных и долгоживущих флуктуаций в системах в точке перехода.

В данной работе проводилось исследование критического поведения однородной и структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга с применением методов Монте-Карло и кластерного алгоритма Вольфа [2], были вычислены значения эффективных амплитуд взаимодействия флуктуаций параметра порядка в однородном поле и в поле дефектов — g_R^∞ и u_R^∞ соответственно.

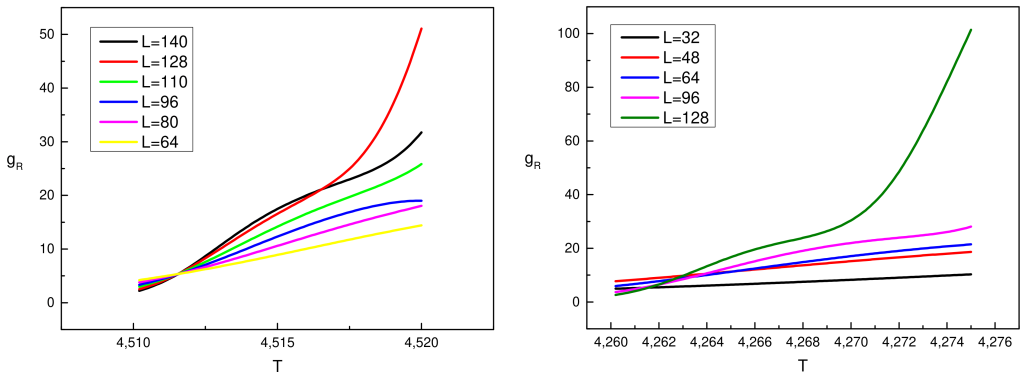


Рис. 1. Температурная зависимость g_R для a) однородной трехмерной модели Изинга и b) структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга со спиновой плотностью $p = 0.95$.

По результатам компьютерного исследования производилась оценка значений g_R^∞ для обеих моделей (Рис. 1) и u_R^∞ для структурно неупорядоченной модели. Величины g_R^∞ и u_R^∞ был получены при фиксированном значении отношения линейного размера системы к корреляционной длине $L/\xi = 5$ при помощи аппроксимации на основе скейлинговой зависимости $g_R(\tau) = g_R^\infty(1+\alpha\tau^\theta)$, где τ — это приведённая температура ($\tau = (T - T_C)/T_C$), θ — индекс поправки к скейлингу. Полученные значения ${g_R}^\infty = 23.83(5)$ для однородной модели и $g_R^\infty = 37.723$ и $u_R^\infty = 10.19(3)$ для структурно неупорядоченной модели находятся в согласии с теоретико-полевыми значениями и значениями, вычисленными с помощью различных методов суммирования [3,4], что говорит о хорошей применимости методов Монте-Карло для исследования критического поведения подобных систем.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002).

1. A.M. Ferrenberg *et al.*, Phys. Rev. E **97**, 043301 (2018).
2. U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1962).
3. В.В. Прудников *et al.*, ЖЭТФ 132, 417 (2007).
4. H.G. Ballesteros *et al.*, Phys. Lett. B **441**, 330 (1998).

Переохлаждение расплавов Al-Cu-Co при 15 ат.% Co в условиях медленного охлаждения в контейнере

Ю.И. Бронникова[1]*, Л.В. Камаева[2], В.И. Ладьянов[2]

[1]Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия
[2]Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
*e–mail: yulya.bronnikova.2001@bk.ru

Методом дифференциального термического анализа (ДТА) в работе исследуются процессы кристаллизации расплавов Al-Cu-Co при 15 ат.% Co и изменении содержания Cu от 10 до 30 ат.% с шагом 2.5 ат.% при небольших скоростях охлаждения. Данный метод позволяет определить температуры фазовых превращений при нагреве и охлаждении сплавов с постоянной скоростью. Исследования проводились в области существования декагональной квазикристаллической фазы (d-фазы).

В результате были получены термограммы сплавов в режиме нагрева и охлаждения, со скоростью 10, 50 и 100 град/мин. По термограммам нагрева были точно определены температуры фазовых превращений, в том числе ликвидус и солидус для исследуемых сплавов, и их концентрационное изменение. Анализ термограммы нагрева показал, что для всех сплавов наблюдается протяженная двухфазная область, а разница температур между солидусом и ликвидусом для некоторых составов превышает 500°C.

Анализ данных ДТА позволил построить концентрационное сечение при 15 ат.% Co для системы Al-Cu-Co (10 – 30 ат.% Cu), а также выделить концентрационные интервалы, в которых изменяется характер плавления сплавов Al-Cu-Co.

По термограммам охлаждения исследуемых образцов, при скоростях охлаждения 100 град/мин от различных температур были определены температуры начала кристаллизации исследуемых сплавов. Данные термограмм охлаждения позволили построить температурные и концентрационную зависимости переохлаждения. При охлаждении расплава со скоростью 100°C/мин температура расплава, от которой начинается охлаждение не влияет на величину переохлаждения. Максимальное влияние скорости охлаждения проявляется в процессах, протекающих в низкотемпературной области (вблизи температуры солидус). Кристаллизация сплавов начинается в условиях средних переохлаждений 50 – 150°C и зависит от концентрации, максимальные переохлаждения наблюдаются для сплава $Al_{57.5}Cu_{27.5}Co_{15}$. Концентрации, при которых наблюдается изменение типа кристаллизации или характера концентрационного изменения переохлаждения, соответствуют особенностям на линии ликвидус, что указывает на влияние химического взаимодействия в расплавах на первом этапе кристаллизации. Термограммы в режимах охлаждения и нагрева хорошо согласуются между собой. Термограммы при охлаждении отличаются для составов из различных областей фазовой диаграммы состояния, поэтому можно выделить 3 концентрационных интервала с различным типом кристаллизации: 10 — 12.5 ат.% Cu; 15 — 17.5 ат.% Cu и 22.5 — 30 ат.% Cu.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00912, https://rscf.ru/project/22-22-00912/.

Динамика водородных связей в воде в окрестности перехода «жидкость-жидкость»

Р.В. Власов*, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*e–mail: roman.vlasoff@outlook.com

За последние 30 лет появилась концепция, в которой было установлено, что жидкости могут иметь совершенно различную структуру ближнего порядка. И между разными состояниями жидкости при изменении давления могут быть фазовые превращения «жидкость-жидкость» [1,2]. Было установлено, что с увеличением давления многие характеристики жидкости при переходе «жидкость-жидкость» изменяются существенным образом, но меняются непрерывно и без скачков. Это подтверждается как экспериментально, так и на основе результатов молекулярно-динамических расчетов [3]. Так как вода обладает аномальными свойствами, отличающими её от других жидкостей, её изучение и исследования продолжаются. В частности, особенности динамики воды, определяемые водородными связями (ВС), представляют интерес при рассмотрении перехода «жидкость-жидкость».

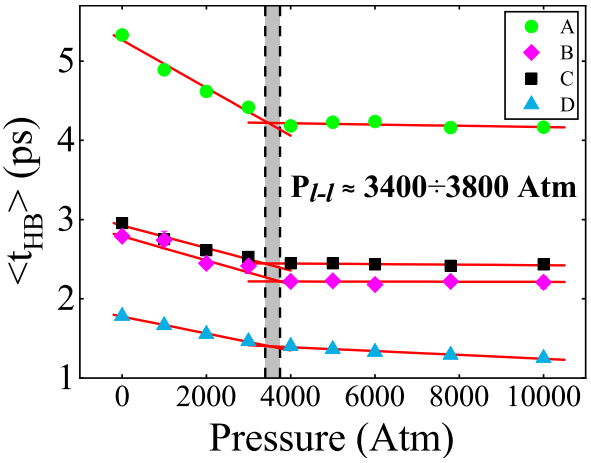


Рис. 1. Зависимость среднего времени жизни водородных связей $\langle \tau_{HB} \rangle$ от давления на изотерме $T = 293$ K. A-D соответсвуют различным способам вычисления $\langle \tau_{HB} \rangle$.

В рамках молекулярной динамики обнаружено, что жидкая вода характеризуется двумя динамическими режимами, которые связаны с двумя формами, называемыми вода низкой плотности (ВНП) и вода высокой плотности (ВВП). Данные формы различаются строением ближнего порядка. Диапазон давлений P_{l-l}, в котором происходит переход «жидкость-жидкость» на изотерме $T = 293$ K, определялся по функции радиального распределения $g_{OO}(r)$ и по параметру Вендта-Абрахама r^{WA}. Установлено, что при переходе «жидкость-жидкость» в динамических и транспортных параметрах, среди которых среднее время жизни (ВС) $\langle \tau_{HB} \rangle$, среднее время жизни различных координированностей молекул воды $\langle \tau_N \rangle$ и коэффициент самодиффузии D_s, наблюдаются выраженные изменения. Согласно результатам расчета $\langle \tau_{HB} \rangle$, в области ВНП среднее время жизни ВС уменьшается с ростом давления, в то время как в области ВВП этот параметр перестает значительно изменяться (рис. 1). Таким же образом ведет себя параметр $\langle \tau_N \rangle$. Также в окрестности перехода «жидкость-жидкость» коэффициент самодиффузии D_s имеет максимум.

Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 19-12-00022-П). Авторы признательны за поддержку Фонду развития теоретический физики и математики «Базис» (проект № 20-1-2-38-1).

1. В.В. Бражкин и др., УФН **169(9)**, 1035 (1999).

2. V.V. Brazhkin, A.G. Lyapin, J. Phys.: Condens. Matter **15(36)**, 6059 (2003).

3. S. Fanetti et al., J. Phys. Chem. Lett. **5(1)**, 235 (2014).

Индуцирование сверхпроводимости в антиферромагнитном $Fe_{1.1}Te$ при допировании дисульфидом титана

Е.В. Кислов*, Н.В. Селезнева, Н.В. Баранов

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

*e–mail: eu.kislov@gmail.com

Халькогениды железа, относящиеся к структурному типу PbO и кристаллизующиеся в пространственной группе $P4/nmm$, имеют слоистую структуру, в которой атомы железа расположены в слое между двумя слоями халькогена и имеют тетраэдрическое окружение. Такая кристаллическая структура позволяет путем замещений атомов железа и/или халькогена существенно модифицировать свойства таких материалов [1]. Так, селенид железа FeSe, демонстрирующий переход в сверхпроводящее состояние при $T_C = 8$ K, показывает заметное увеличение до значений $T_C = 15$ K при пятидесятипроцентном замещении селена теллуром в соединении $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ [2]. В отличие от схожего по строению FeSe, теллурид железа FeTe не имеет сверхпроводящего перехода и обладает антиферромагнитным упорядочением ниже $T_N = 70$ K [3].

В настоящей работе изучено влияние допирования дисульфидом титана TiS_2 на транспортные свойства антиферромагнитного соединения $Fe_{1.1}Te$, а также исследованы условия формирования сверхпроводящего состояния. Предполагалось, что при допировании атомы S займут позиции теллура, а атомы Ti, не имеющие собственного магнитного момента, будут занимать позиции железа в тетрагональной структуре FeTe.

Образцы системы $Fe_{1.1}Te(TiS_2)_y$ ($y = 0$, 0.04, 0.08, 0.1, 0.2) были получены методом плавления в две стадии. На первом этапе были получены образцы $Fe_{1.1}Te$ плавлением исходных компонентов при температуре 920°C; на втором этапе в матрицу добавляли предварительно приготовленный дисульфид титана, после чего полученную смесь измельчали, прессовали и повторно плавили при 920°C с последующим медленным охлаждением для гомогенизации образцов. Рентгеноструктурный анализ проводился на дифрактометре `Bruker D8 ADVANCE` с последующей обработкой результатов программным комплексом `FullProf`. Измерение температурных зависимостей электросопротивления проводилось стандартным 4-х контактным методом в интервале температур $2 - 180$ K.

Установлено, что полученный образец исходного состава $Fe_{1.1}Te$ является однофазным и имеет тетрагональную структуру, которая описывается пространственной группой $P4/nmm$. Допирование исходной матрицы дисульфидом титана приводит к фазовому расслоению и неоднородности образцов. Так, в дополнение к исходной тетрагональной в допированных образцах могут наблюдаться примесные фазы, такие как фробергит $FeTe_2$ и TiS_2 в зависимости от состава.

Из данных температурных зависимостей электросопротивления допированных образцов $Fe_{1.1}Te(TiS_2)_y$ ($y = 0.04$, 0.08, 0.1, 0.2) следует, что добавление дисульфида титана приводит к индуцированию перехода в сверхпроводящее состояние. Температура начала перехода увеличивается с ростом концентрации допированного элемента до $T_C = 9.2$ K для образца с $y = 0.1$, после чего спадает до $T_C = 8.7$ K для $y = 0.2$. При этом оказалось, что переход в сверхпроводящее состояние при понижении температуры не завершается, по-видимому, из-за присутствия посторонних фаз, а также гранулированного характера сверхпроводимости.

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

1. Y. Mizuguchi, Y. Takano, J. Phys. Soc. Japan **79**, 102001 (2010).

2. Y. Mizuguchi *et al.*, J. Phys. Soc. Japan **78**, 074712 (2009).

3. P.K. Maheshwari *et al.*, J. Supercond. Nov. Magn. **28**, 2893 (2015).

Физические свойства соединений $Fe_{1-\delta}Se$ ($\delta = 0.125, 0.25$) с замещением диспрозием по катионной подрешетке

В.А. Комарова*, С.Н. Мозговых, Е.М. Шерокалова, Н.В. Селезнева

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: lera.komarova.200094@gmail.com

Соединения Fe_3Se_4 и Fe_7Se_8 имеют слоистую структуру типа NiAs, пространственная группа $I12/m1$ и $P3_121$ соответственно. Ниже критической температуры $T_N \sim 320$ К в соединении Fe_3Se_4 и $T_N \sim 450$ К в Fe_7Se_8 формируется дальний ферримагнитный порядок. Дополнительный фазовый магнитный переход, связанный со сменой легкой плоскости c на конус осей легкого намагничивания, наблюдается в Fe_7Se_8 при температуре порядка $T_{sro} \sim 120$ К [1, 2]. Известно, что замещение железа другими 3d элементами позволяет существенно влиять на магнитные характеристики соединений, в том числе температуру магнитного фазового перехода и величину намагниченности [3, 4]. Нами не обнаружено данных по влиянию замещения атомами редкоземельных элементов. В данной работе представлены результаты аттестации и исследования физических свойств поликристаллических соединений $Fe_{2.95}Dy_{0.05}Se_4$ и $Fe_{6.95}Dy_{0.05}Se_8$.

Составы Fe_3Se_4, Fe_7Se_8 и $Fe_{2.95}Dy_{0.05}Se_4$ получены методом твердофазного ампульного синтеза при температуре 800°C. Состав $Fe_{6.95}Dy_{0.05}Se_8$ получен через расплав при $T = 1000$°C. Аттестация проводилась с помощью рентгенофазового анализа. Температурные и полевые зависимости намагниченности измерялись в интервале температур 2−300 К в полях до 70 кЭ.

Рассчитанные кристаллографические параметры исходных соединений Fe_3Se_4, Fe_7Se_8 хорошо согласуются с результатами, представленными в литературных источниках [1, 2]. Замещение атомов железа диспрозием не приводит к существенным изменениям структуры соединений $Fe_{2.95}Dy_{0.05}Se_4$ и $Fe_{6.95}Dy_{0.05}Se_8$, незначительно меняются параметры кристаллической решетки.

Соединения $Fe_{3-x}Dy_xSe_4$ и $Fe_{7-x}Dy_xSe_8$ ($x = 0$, 0.05) обладают ферримагнитным порядком ниже T_N. Значение T_N незначительно уменьшается, в сравнении со значениями для незамещенных соединений, при этом ширина магнитного фазового перехода становится значительно больше. В соединении $Fe_{6.95}Dy_{0.05}Se_8$, как и в исходном Fe_7Se_8, наблюдается спинпереориентационный переход при температуре немного меньшей ($T_{sro} \sim 100$ К).

Используя набор зависимостей $M(T)$ вблизи температуры магнитного упорядочения, полученных при различных значениях внешнего магнитного поля (до 70 кЭ), рассчитано изменение магнитной части энтропии с целью оценки величины магнитокалорического эффекта (МКЭ). В соединениях Fe_3Se_4 и $Fe_{2.95}Dy_{0.05}Se_4$ максимальная величина составила $|\Delta S_M| = 0.60$ Дж/К·кг при изменении магнитного поля до 70 кЭ. Для $Fe_{6.95}Dy_{0.05}Se_8$ величина МКЭ рассчитана только в области температуры T_{sro}, максимальная амплитуда изменения $|\Delta S_M|$ достигает 0.3 Дж/К·кг при $T = 100$ К и изменении магнитного поля на величину 70 кЭ.

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

1. A.F. Andresen, Acta Chem. Scand **3**, 827 (1968).

2. A. F. Andresen, J. Leciejewicz, J. de Physique **25**, 574 (1964).

3. J. R. Regnard, J. Chappert, J. de Physique **34**, 721 (1973).

4. P. Terzieff, J. Phys. Chem. Solids **43**, 305 (1982).

Прогнозирование роста аустенитного зерна сталей с карбонитридным упрочнением

Е.И. Корзунова*, И.И. Горбачев

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

*e–mail: korzunova1996@imp.uran.ru

При производстве сталей для получения определённых эксплуатационных свойств часто необходимо контролировать рост зерна при термической и термомеханической обработке. Это можно делать, в частности с помощью карбидов, нитридов и карбонитридов Ti, Nb, V и Al. В данной работе оценивалась возможность прогнозирования динамики роста аустенитного зерна в процессе термообработки на основе подхода, предложенного в [1], согласно которому скорость изменения размера зерна описывается выражением:

$$\frac{dD}{dt} = M_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)\gamma\left(\alpha\frac{1}{D} - \beta\frac{f}{r}\right), \tag{1}$$

где M_0 — предэкспоненциальный множитель, а Q — энергия активации движения границы зерна, T — температура, R — универсальная газовая постоянная, γ — зернограничная энергия, α и β — константы, D — средний диаметр зерна, r — радиус частиц, f — объемная доля частиц.

Аналогично тому, как это делалось в нашей работе [2], для оценки тормозящей силы выделений вместо отношения f/r в уравнении использовалось выражение: $\left[\sum_i (f_i/r_i)\right]^{-1}$.

При этом описание эволюции выделений вторых фаз в процессе термообработки осуществлялось на основе модели, представленной в [3].

Для проверки корректности работы разработанного алгоритма было выполнено сравнение результатов расчётов с экспериментальными данными [4,5]. Результаты сравнения, представленные на рис. 1, показывают их удовлетворительное согласие.

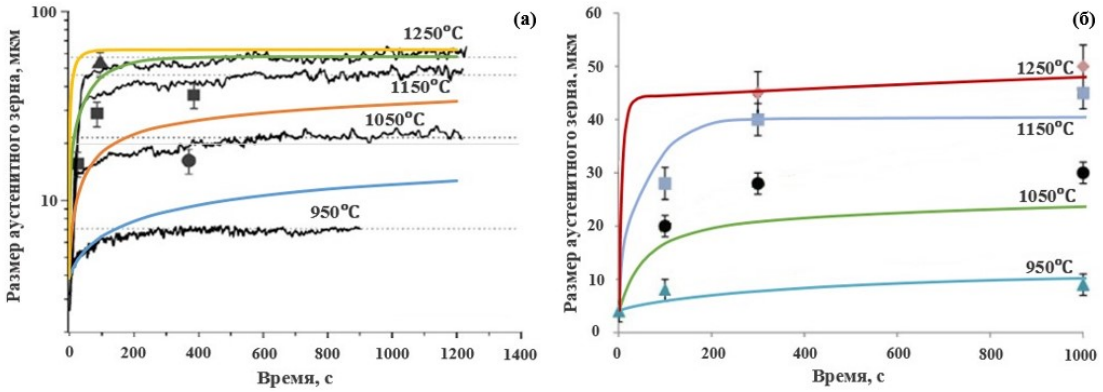


Рис. 1. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными (а) — [4] и (б) — [5]. Цветные линии — расчёт, чёрные линии и точки — экспериментальные данные.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция» № 122021000035-6)

1. P. Hellman, M. Hillert, Scand J Metall. **4**, 211 (1975).
2. И.И. Горбачёв *и др.*, ФММ **116**, 1184 (2015).
3. V.V. Popov *et al.*, Phil. Mag. **96**, 3632 (2016).
4. M. Maalekian *et al.*, Acta Materialia. **60**, 1015 (2012).
5. G. Khalaj *et al.*, Materials Science and Technology **30**, 424 (2014).

Изучение электронной структуры и критических точек в системе Ti_xTiSe_2 в сравнении с системой Fe_xTiSe_2

А.Ю. Кузнецова[1]*, Е.А. Суслов[1,2], А.Н. Титов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский государственный аграрный университет, Екатеринбург, Россия
*e–mail: cuznecova89634485295@mail.ru

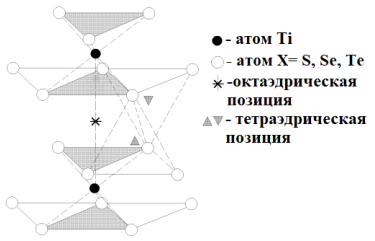


Рис. 1. Структура слоистых дихалькогенидов титана.

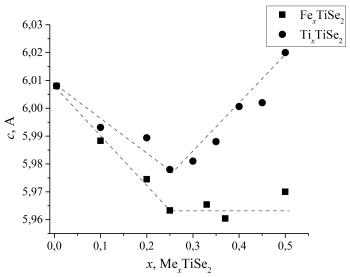


Рис. 2. Зависимость параметра элементарной решетки c от содержания.

Дихалькогениды переходных металлов типа MX_2 (X — это S, Se, Te) интересны своей слоистой структурой и слабой Ван-дер-Ваальсовой связью между слоями, так как существует возможность обратимо внедрять атомы или даже целые молекулы в межслоевое пространство. На рис. 1 представлена структура соединений MX_2 и отмечены позиции для интеркалантов. При этом полученные новые материалы будут иметь другие свойства отличны от свойств матричной фазы.

Соединения Me_xTiSe_2 (Me — $3d$-металлы), вызывают интерес в виду изменения их магнитных и электрических свойств. Такие эффекты связывают с изменением электронной структуры. В работе [1] приводятся результаты исследования системы Ti_xTiSe_2 ($x > 0.5$) методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Авторы [1] показали, что присутствие атомов Ti в межслоевом пространстве приводит к образованию связи Ti-Ti между атомами титана в регулярных позициях решетки и атомами в межслоевом пространстве.

В работах [2, 3] была изучена электронная структура системы Fe_xTiSe_2 методом ЭДС, полученные данные были подтверждены спектральными методами. Исследователями был определен состав $Fe_{0.25}TiSe_2$ при котором происходит образование связи Ti-Fe-Ti, а при составе $Fe_{0.5}TiSe_2$ эти связи разрываются и образуются связи Fe-Fe в межслоевом пространстве. Эти системы схожи способностью образовывать прямую химическую связь в подрешётке интеркаланта без участия решётки-хозяина при больших концентрациях. На графике зависимости параметра элементарной ячейки c от содержания интеркаланта в системе Me_xTiSe_2 (Рис. 2) можно заметить разное поведение параметра при $x > 0.25$. Для Fe_xTiSe_2 параметр c остается постоянным, что говорит о достижении максимальном сжатии кристаллической решетки, чего не происходит в Ti_xTiSe_2. В Ti_xTiSe_2 при $x > 0.25$ параметр c после монотонного сжатия, резко начинает расти, что говорит об расширении кристаллической решетки, а также об изменении природы связи между атомами интеркаланта и решётки.

В данной работе была синтезирована и изучена методом ЭДС система Ti_xTiSe_2 ($0 < x < 0.5$, $\Delta x = 0.05$) с целью определения критических точек и структурных переходов.

Работа выполнена при финансовой поддержке научного проекта РФФИ № 20-03-00275.

1. A.S. Shkvarin *et al.*, Inorganic Chemistry **60**, 185 (2020).
2. A.S. Shkvarin *et al.*, RSC Advances **6**, 106527 (2016).
3. E.A. Suslov *et al.*, The Journal of Physical Chemistry A **125**, 1981 (2021).

ТЕМ и HRTEM исследование фазового расслоения в $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$

Д.Д. Кузнецов[1]*, А.В. Маширов[1], Е.И. Кузнецова[2,5], А.С. Лошаченко[3], Д.В. Данилов[3], Г.А. Шандрюк[4], В.В. Коледов[1], В.Г. Шавров[1]

[1]Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
[4]Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия
[5]Уральский государственный аграрный университет, Екатеринбург, Россия
*e–mail: kuznetsov.dmitry89@gmail.com

Сплавы на основе Ni-Mn-In, широко изучающиеся из-за их магнитно-калорических свойств и управляемых мартенситных превращений, обычно формируются по стехиометрии 2:1:1, как полные сплавы Гейслера. Любое отклонение от этой стехиометрии приводит к распаду [1], что влияет на характер мартенситного превращения и может препятствовать проявлению его обратимости.

Проведен структурный анализ аустенита нестехиометрического сплава $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$. На микрофотографиях сплава (рис. 1) наблюдаются как области полностью упорядоченной фазы $L2_1$ (рис. 1б) так и области, характеризующиеся твидовой структурой с диффузным рассеянием и дополнительными рефлексами на электронограммах (рис. 1в, г). Анализ ТЕМ с высоким разрешением позволил выявить микроструктуру твида с чередованием темных и светлых доменов 2–5 нм. Полосчатый контраст, простирающийся через все поле рис. 1д, образован проекциями плоскостей $\{220\}_{L2_1}$ с межплоскостным расстоянием $d_{220} = 0.225$ нм. Эти полосы непрерывно проходят через все домены, что указывает на то, что границы между доменами когерентны.

Полученные результаты рассматриваются как единое явление, в котором происходят совместно два процесса, а именно, атомное упорядочение и распад твердого раствора. В результате образуется структура, состоящая из упорядоченных доменов, разделенных частицами распада. Такой процесс происходит, например, в некоторых сплавах системы золото-медь-серебро [2] и является комплексной непрерывной реакцией «упорядочение–распад». Результаты настоящего исследования указывают на то, что концентрационное расслоение происходит по механизму спинодального распада.

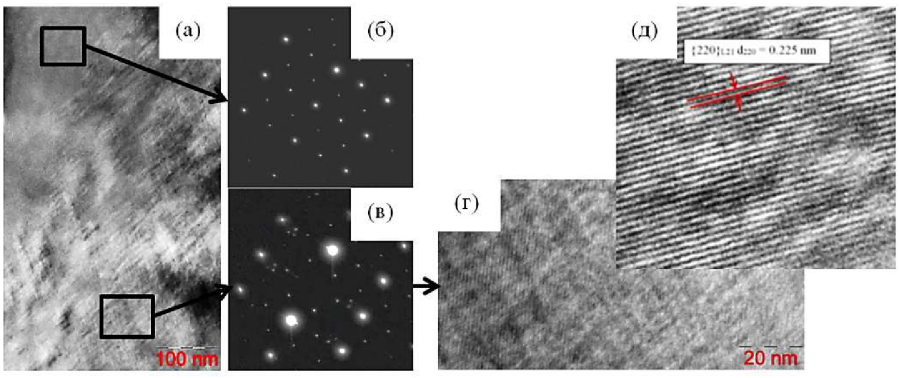


Рис. 1. Микрофотография сплава $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$ (а) и микродифракционные картины (б, в) от участков с разной структурой. Микрофотографии высокого разрешения от области с твидовой структурой (г, д).

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 20-79-10197.

1. P. Entel *et al.*, Frustrated Materials and Ferroic Glasses. Springer Series in Materials Science **275** (2018).
2. В. Д. Суханов, Т. С. Бояршинова, О. Д. Шашков, ФММ **68**, 161 (1989).

Трехвершинная модель Поттса с конкурирующими взаимодействиями на объемно-центрированной кубической решетке

Д.Р. Курбанова*, К.Ш. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев

Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
*e–mail: d_kurbanova1990@mail.ru

Природа фазового перехода модели Поттса с различным числом состояний спина q ограничена ферромагнитным взаимодействием между ближайшими соседями. В зависимости от числа состояний спина q и пространственной размерности модель Поттса демонстрирует температурный фазовый переход (ФП) первого или второго рода. Критические свойства ферромагнитной модели Поттса достаточно хорошо изучены в двумерном случае [1,2]: при $q > 4$ система демонстрирует ФП первого порядка, в то время как при $q \leqslant 4$ переход непрерывен. Для трехмерного случая известно, что при $q > 3$ в системе наблюдается фазовый переход первого рода. Поведение антиферромагнитной модели Поттса считается более сложной, поскольку сильно зависит от микроструктуры решетки. Еще одним интересным моментом в антиферромагнитной модели Поттса является то, что данная модель имеет ненулевую энтропию основного состояния без фрустрации. Ненулевая энтропия основного состояния $S_0 \neq 0$, является важным предметом статистической механики. Одним из физических примеров является спиновый лед.

В настоящей работе на основе репличного алгоритма метода Монте-Карло мы исследуем влияние конкуренции обменного взаимодействия на фазовые переходы и термодинамические свойства трехмерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на объемно-центрированной кубической решетке. Гамильтониан модели:

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

где J_1 и J_2 — параметры обменных взаимодействий для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 8 \div 64$.

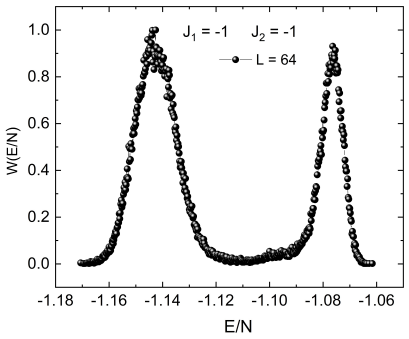


Рис. 1. Гистограмма распределения энергии для $J_2 = -1.0$ при $L = 64$.

Гистограммным методом проведен анализ порядка фазовых переходов. На Рис. 1 представлена гистограмма распределения энергии для случаев $J_2 = -1.0$ с линейными размерами $L = 64$. Наблюдается бимодальное распределение энергии, что характерно для ФП первого рода $T_N = 1.925(2)$) (температура дана в единицах $|J_1|/k_B$). Без учета взаимодействия вторых соседей ($J_2 = 0$), в исследуемой модели наблюдается фазовый переход второго рода.

Таким образом, установлено, что конкуренция обменного взаимодействия приводит к смене типа фазового перехода.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МК-5223.2022.1.2.

1. F.Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).

2. R.J. Baxter, J. Phys. C **6**, 445 (1973).

Температуры фазовых равновесий и процессов кристаллизации расплавов Al–Cu–Co при 25 ат. % Cu

Т.И. Латыпов[1]*, Л.В. Камаева[2], Н.М. Щелкачев[3]

[1]Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия
[2]Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
[3]Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Россия
*e–mail: latypov.timur.2001@mail.ru

Система Al-Cu-Co имеет стабильную квазикристаллическую фазу — d-AlCuCo с декагональной структурой. Существование таких фаз в твердом состоянии часто связывают с икосаэдрическим ближним порядком в расплавах. Поэтому системы на основе Al, в которых наблюдаются сложные кристаллические структуры, а также равновесные квазикристаллические фазы рассматриваются как перспективные объекты для исследования структурной наследственности при кристаллизации [1]. При исследовании структурной наследственности между жидким и твердым состояниями важной характеристикой является величина переохлаждения (ΔT), которая определяется как разность между температурой равновесного фазового перехода жидкое-твердое и температурой начала кристаллизации. Переохлаждение с одной стороны зависит от структуры расплава перед кристаллизацией, а с другой стороны определяет условия роста и морфологию образующихся твердых фаз. В связи с этим целью работы является изучение концентрационной зависимости переохлаждения расплавов Al-Cu-Co в области стехиометрии d-фазы (при 25 ат.% Cu и 2.5 – 20 ат.% Co).

Исследования проводили методом дифференциального термического анализа (ДТА). ДТА — метод термического анализа, при котором регистрируемым параметром служит разность температур между образцом и эталоном, измеряемая при нагревании или охлаждении с постоянной скоростью, которая может быть представлена в виде функции температуры образца, эталона и нагревателя [2]. По термограммам ДТА в режиме нагрева были определены температуры всех фазовых превращений в исследуемых сплавах, что позволило построить область концентрационного сечения тройной диаграммы состояния системы Al-Cu-Co при 25 ат. % Cu, а также выделить концентрационные интервалы, в которых изменяется характер плавления сплавов Al-Cu-Co и определить концентрационное поведение температуры ликвидус.

Анализ процессов кристаллизации проводили при охлаждении от различных температур расплава со скоростями охлаждения 20, 50 и 100°C/мин. По полученным термограммам охлаждения определяли температуры начала кристаллизации, а также последовательность стадий затвердевания. По характеру термограмм охлаждения исследуемый концентрационный интервал можно разделить на 5 областей с различным типом кристаллизации: 1. 2.5 – 7.5 ат.% Co, 2. 7.5 – 10 ат.% Co, 3. 10 – 15 ат.% Co, 4. 15 – 17.5 ат.% Co, 5. 17.5 – 20 ат.% Co. Переохлаждение вычисляли как разность температур ликвидус, определенных по термограммам нагрева и температур начала кристаллизации. Полученные концентрационные зависимости переохлаждения находятся в хорошем согласии с линиями ликвидус и областями с различными типами кристаллизации. Обнаруженные особенности влияния концентрации компонент на процессы затвердевания обсуждаются с учетом данных об изменении химического ближнего порядка в расплавах, полученных с помощью методов ab initio молекулярно-динамического моделирования.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-22-00912.

1. Z.W. Wu *et al.*, Sci. Rep. **6**, 35967 (2016).

2. У. Уэндландт, Термические методы анализа. — М.: Мир (1978).

Моделирование гистерезисных явлений в мультислойных магнитных структурах

Д.А. Льготина*, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия
*e–mail: lgotinada@para-lab.ru

Основная особенность ферромагнитных материалов — это их способность намагничиваться в магнитном поле и сохранять эту намагниченность в течении длительного времени. Эффекты магнитной анизотропии были заданы в виде обобщенной модели Гейзенберга:

$$H = -J_1 \sum_{i,j \in N_1,N_2}^{N_s} [\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \Delta(N) S_i^z S_j^z] - J_2 \sum_{\alpha \in N_1, \beta \in N_2}^{N_s} [\mathbf{S}_\alpha \mathbf{S}_\beta - \Delta(N) S_i^z S_j^z] - A \sum_{i \in N_1,N_2}^{N_s} S_i^z - h \sum_{i \in N_1,N_2}^{N_s} S_i^z \quad (1)$$

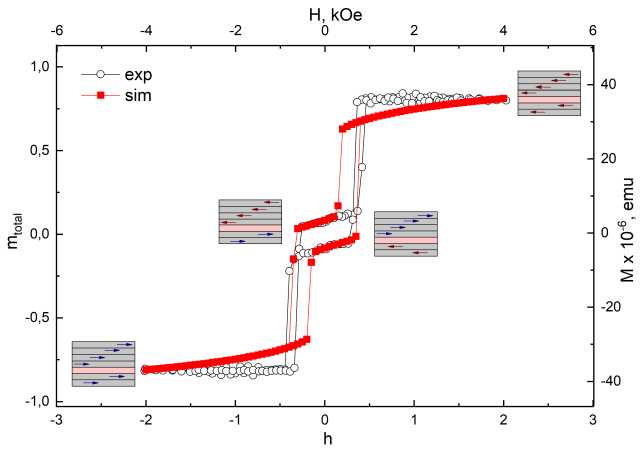


Рис. 1. Петли гистерезиса, для моделируемой структуры (sim) и экспериментального образца (exp). Напротив каждого стабильного магнитного состояния изображена схема магнитной структуры, где стрелками обозначена намагниченность слоя.

Для моделирования гистерезисных явлений применялся алгоритм односпиновых переворотов: алгоритм Метрополиса. Моделирование проводилось при следующих параметрах анизотропии $\Delta(N_1) = 0.56$; $\Delta(N_2) = 0.78$ соответствующих типу анизотропии "лёгкая"плоскость, подбирались в соотношении с данными из работы [1]. Параметры моделирования: $J_2 = -0.2 J_1$; $J_1/k_B T = 1$; $N_1 = 4$; $N_2 = 2$; $L = 32$; $T = 0.9$; $A = 2.9$.

При сравнении петель гистерезиса, полученных методом компьютерного моделирования с результатом эксперимента для образца Pt/Co/Ir/Co/Pt [2], наблюдается качественное согласование петель, с совпадением коэрцитивной силы при $h = 2.2H$, (kOe). В обоих случаях наблюдается четыре магнитных состояния, которые доступны при прокручивании поля. Отклонение ветвей гистерезиса объясняется, тем что для данного моделирования не учитываются эффекты связанные с образованием доменов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002). Для выполнения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

1. P. V. Prudnikov, V. V. Prudnikov *et al.*, EPJ Web Conf. **185**, 11009 (2018).

2. T. Fache *et. al.*, Phys. Rev. B. **98**, 064410 (2018).

Учет влияния эффектов анизотропии при моделировании мультислойных магнитных структур

А.В. Минькова*, П.В. Прудников

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

*e–mail: minkovaav@stud.omsu.ru

Магнитные свойства ультратонких пленок подвержены влиянию магнитной анизотропии [1], создаваемой кристаллическим полем подложки [2]. В настоящей работе изучено влияние двух конкурирующих типов анизотропии — одноионной и легкоплоскостной на поведение трехслойной магнитной структуры Co/Cu/Co. Для моделирования ультратонких магнитных пленок методом Монте-Карло использовалась анизотропная модель Гейзенберга с классическим гамильтонианом

$$H = -J_1 \sum_{i,j \in N_1 N_2} \left[\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \Delta S_i^z S_j^z \right] - J_2 \sum_{\alpha \in N_1, \beta \in N_2} \left[\mathbf{S}_\alpha \mathbf{S}_\beta - \Delta S_i^z S_j^z \right] - A \sum_{i \in N_1 N_2} (S_i^z)^2 - \mathbf{h} \sum_{i \in N_1 N_2} \mathbf{S}_i, \qquad (1)$$

где J_1 и J_2 — интегралы внутрислоевого и межслоевого взаимодействия соответственно, h — приложенное магнитное поле, A — параметр одноионной анизотропии, $\Delta(N)$ — параметр анизотропии типа «легкая плоскость», зависящий от толщины пленок N_1 и N_2, $\mathbf{S}_i$ — классический спин в решетке [3].

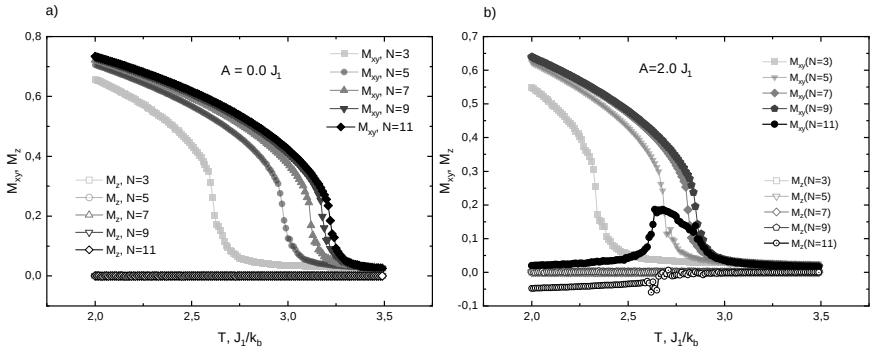


Рис. 1. Температурная зависимость проекций намагниченности **M** для различных толщин пленки с параметрами одноионной анизотропии a) $A = 0$ и b) $A = 2.0\ J_1$. Параметр анизотропии типа «легкая плоскость» уменьшается с ростом числа слоев пленки.

Было проведено исследование поведения намагниченности в высокотемпературной области. По результатам компьютерного моделирования производилась оценка критической температуры: $T_C(A = 0) = 3.018\ J_1/k_b$ и $T_C(A = 2.0\ J_1) = 2.74\ J_1/k_b$. Как видно из данных на рисунке, увеличение параметра одноионной анизотропии приводит к существенному падению значения намагниченности, направленной в плоскости пленки и к увеличению ее значения при рассмотрении вдоль оси, особенно при числе слоев пленки $N > 9$. Поведение намагниченности указывает на наличие фазового перехода второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (0741-2020-0002).

1. X.D. He, L.L. Zhang *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **519**, 167429 (2021).

2. S. Mankovsky, H. Ebert, Electron. Struct. **4**, 034004 (2022).

3. P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov M.V. Mamonova N.I. Piskunova, J. Magn. Magn. Mater. **482** (2019).

Спонтанные и индуцированные полем магнитные фазовые превращения и аномалии физических свойств в слоистом соединении $Fe_{6.5}Cr_{0.5}Se_8$

С.Н. Мозговых[1,2]*, Н.В. Баранов[1,2], А.С. Волегов[1,2], Е.М. Шерокалова[1], В.А. Казанцев[2], Н.В. Селезнева[1]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: Stepan.Mozgovykh@urfu.ru

Соединение Fe_7Se_8 со слоистой кристаллической структурой типа NiAs с чередующимися слоями атомов Fe и Se характеризуется наличием ферромагнитного обменного взаимодействия внутри слоев и антиферромагнитного между слоями. Наличие вакансий в каждом втором слое железа приводит к ферримагнитному упорядочению, которое устанавливается ниже температуры Нееля $T_N \sim 450$ К. При понижении температуры ниже $T_{sro} \sim 120$ К в этом соединении происходит спин-переориентационный переход, связанный с изменением ориентации магнитных моментов относительно кристаллографических осей; при этом тип магнитного упорядочения не изменяется. Предыдущие исследования показали [1], что частичное замещение атомов железа в Fe_7Se_8 атомами других 3d-элементов может оказывать сильное влияние на поведение намагниченности в этом соединении, однако природа такого влияния до сих пор не установлена.

В данной работе было проведено комплексное исследование соединения $Fe_{6.5}Cr_{0.5}Se_8$ для установления роли замещающих элементов как на поведение намагниченности, так и на другие физические свойства. Были получены монокристаллы $Fe_{6.5}Cr_{0.5}Se_8$, ориентировка которых определялась методом Лауэ на отражение. Изучение магнитных свойств проводилось как на монокристаллическом, так и поликристаллическом образцах. Поликристалл получался путём перетирания монокристаллов. Магнитные измерения проводились на вибромагнетометре 7407 VSM (Lake Shore, USA) в температурном интервале $300 - 550$ К в полях до 17 кЭ, и на установке PPMS DynaCool в температурном интервале 4 – 300 К в полях до 90 кЭ. Кроме того, были проведены измерения намагниченности в импульсных магнитных полях до 270 кЭ. На монокристалле $Fe_{6.5}Cr_{0.5}Se_8$ были получены температурные зависимости электросопротивления в диапазоне температур $4 - 300$ К, а также измерена полевая зависимость электросопротивления при $T = 5$ К в полях до 90 кЭ. На дилатометре DL-1500 RHP компании ULVAC-SINKU RIKO (Япония) в интервале температур от 80 К до 700 К были проведены измерения теплового расширения.

Установлено, что в соединении $Fe_{6.5}Cr_{0.5}Se_8$ переход в ферримагнитное состояние происходит при температуре $T_N \sim 440$ К, что сопровождается аномалией теплового расширения. При температуре $T_{cr} = 150$ К на полевой зависимости восприимчивости наблюдается одинаковое поведение намагниченности при измерениях монокристалла вдоль различных кристаллографических направлений, а также при измерениях на поликристалле. Наряду с необычным поведением намагниченности при этой температуре обнаружены аномалии на температурных зависимостях теплового расширении электросопротивления. Кроме того, при комнатной температуре на монокристалле обнаружена значительная коэрцитивная сила $H_C = 12$ кЭ. Из данных по тепловому расширению рассчитана объёмная магнитострикция, которая, как установлено, является отрицательной и по абсолютной величине достигает $\sim 10^{-3}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00158).

1. P. Terzieff, Journal of physics and chemistry of solids. **4**, №2, 125 (1983).

Применение термомеханических свойств Ti_2NiCu в современных технологиях

Е.В. Морозов[1]*, В.В. Коледов[1], В.Г. Шавров[1], А.В. Шеляков[2], Р.А. Антонов[1], А.П. Каманцев[1]

[1]Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия
*e–mail: evgvmorozov@gmail.com

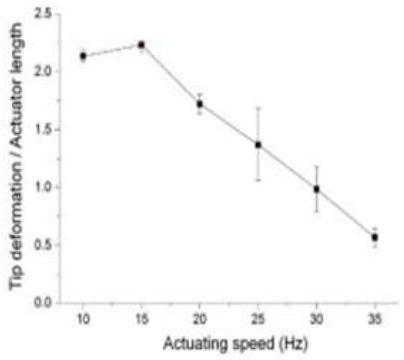


Рис. 1. Зависимость относительной деформации образца от частоты срабатывания актюатора.

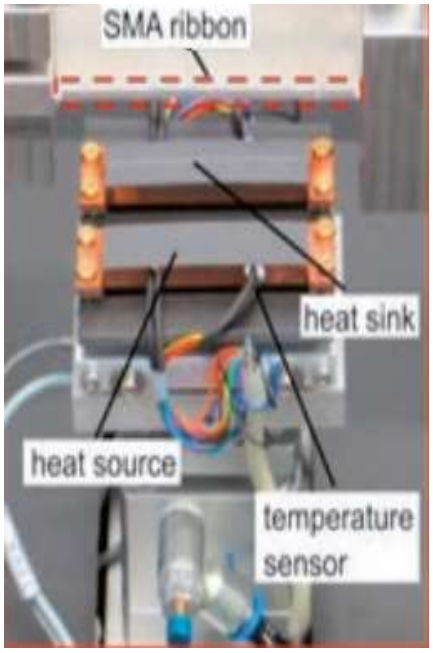


Рис. 2. Прототип эластокалорического теплового насоса

В последние годы обнаружено и исследуется множество твердотельных материалов, в которых ФП сопровождаются гигантскими деформациями и изменениями энтропии. Новые материалы, как ожидают, найдут применение в технологии сенсоров и микроактюаторов, а таже в технологии твердотельного охлаждения при создании твердотельных тепловых насосов.

В работе [1] получен один из самых быстродействующих микроактюаторов на 2016 год микроактюатора из сплава Ni-Ti с ЭПФ. На рис. 1. Изображена зависимость деформации от частоты актюатора. Видно, что с увеличением частоты, резко падает амплитуда. Максимальная частота срабатывания актюатора составляла $f = 35$ Гц.

На рис. 2. изображен прототип теплового насоса с ЭКЭ с использованием сплава Ti-Ni-Fe в роли рабочего тела. Частота циклов передачи тепла от холодного к горячему резервуару не превышала 1 Гц, разница температуры между холодным и горячим не превышала 5 К. При этом, коэффициент эффективности процесса охлаждения составил 4,9 [2]. Эта работа еще далека до практического применения, например, для охлаждения процессоров или фотоприемников в электронных устройствах, но убедительно доказывает сам физический принцип твердотельного охлаждения. Поэтому поиск новых функциональных материалов и изучение принципов твердотельного охлаждения очень актуален на сегодняшний день.

Целью настоящей работы является изучение возможности применения сплава Ti_2NiCu в технологии сенсоров и микроактюаторов, а также в технологии твердотельного охлаждения при создании твердотельных тепловых насосов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 22-19-00783.

1. S. H. Song *et al.*, Sci. Rep., **6**, C1 (2016).
2. J. Frenzel *et al.*, MRS Bull. **43**, C280 (2018).

Влияние интеркалации кобальта на эффективную массу электрона при электрохимическом титровании Na-$Co_n TiSe_2$

А.О. Онищенко[1,2*], А.Ю. Кузнецова[1], Е.А. Суслов[1], М.С. Постников[1], А.Н. Титов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: tolya_onishenko@mail.ru

Материалы, интеркалированные натрием, вызывают значительный интерес в качестве материалов аккумуляторных батарей. Это связано с ограниченностью запасов лития и тем, что натрий несравненно дешевле в производстве.

Одной из основных проблем при создании натрий-ионной батареи является отсутствие анодных материалов, способных эффективно сохранять ионы натрия. По сравнению с катионом лития (0.76 Å), больший ионный радиус натрия (1.02 Å) осложняет твердотельную диффузии ионов, что сказывается на скорости зарядки и низкой циклической стабильности батареи [1].

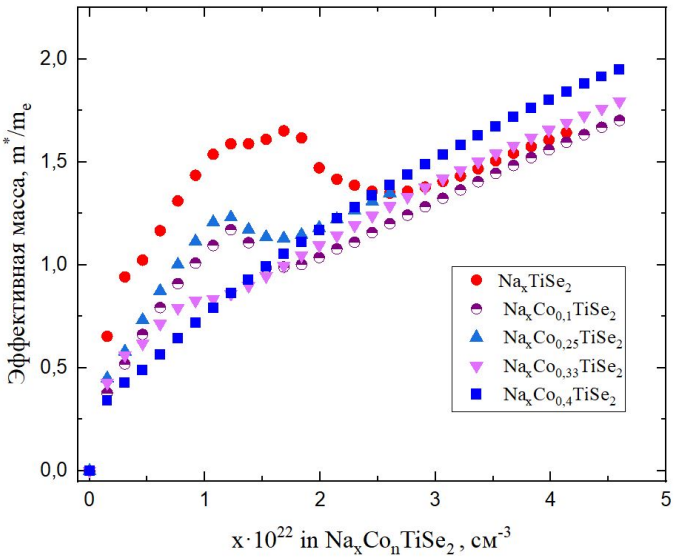


Рис. 1. Зависимость эффективной массы электрона от концентрации Na в $Na_xCo_nTiSe_2$

В связи с этим из-за высокой электропроводности и большого межслоевого интервала предпочтительным становится использование халькогенидов переходных металлов в качестве материалов для анода. Известно так же, что такие материалы, и в частности $TiSe_2$, предварительно интеркалированные переходными металлами, показывают высокую стабильность объёма в процессе инжекция-экстракция [2]. Диселенид титана, выступающий в качестве анода в натрий-ионном аккумуляторе, хорошо изучен[4], однако исследований для Co_nTiSe_2 в этой области до сих пор не проводились.

В данной работе нами выполнено внедрение натрия в $TiSe_2$, предварительно интеркалированный кобальтом. В рамках теории К. Вагнера [3] получена зависимость химического потенциала Na^+ ионов в $Na_xCo_nTiSe_2$ для $x \in [0,3]$ и $n = 0, 0.1, 0.25, 0.33, 0.4$. Рассчитана зависимость эффективной массы электрона от концентрации Na в $Na_xCo_nTiSe_2$ (рис. 1).

Сравнение кривой эффективной массы Na-Co_nTiSe_2 с полученной нами же кривой для Na-$TiSe_2$ указывает на изменение электронной структуры Co_nTiSe_2.

1. Z.Xu, G.Yoon, *et al.*, Nat. Commun. **10**, 2598 (2019).
2. E.G. Shkvarina, A.I. Merentsov, M.S. Postnikov, A.S. Shkvarin, S.V. Pryanichnikov, I. Píš, S. Nappini, F. Bondino, A.N. Titov, Journal of Materials Chemistry C **9**, 1657 (2021).
3. К.Вагнер, Термодинамика сплавов. — М.: Металлургиздат (1957).
4. R. Zheng, H. Yu, X. Zhang, Y. Ding, M. Xia, K. Cao, J. Shu, A. Vlad, B.-L. Su, Angew. Chem. Int. Ed. **60**, 18430 (2021).

Эволюция микроструктуры и свойств упорядоченного сплава Cu-56 ат.% Au под влиянием пластической деформации

П.О. Подгорбунская[1,2]*, О.В. Антонова[1], О.С. Новикова[1], А.А. Гаврилова[2], А.Ю. Волков[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: polina.podgorbunskaya@yandex.ru

Эквиатомный сплав Cu-50 ат.% Au нашел применение в различных областях техники [1]. В последнее время возник запрос промышленности к разработке сплавов с более высоким комплексом функциональных свойств. Одним из путей решения этой проблемы является переход на нестехиометрический сплав Cu-56 ат.% Au. Однако эволюция микроструктуры упорядоченного сплава Cu-56Au под влиянием пластической деформации до сих пор не рассматривалась, особенности его деформационного поведения до конца не выяснены. При этом очевидно, что в процессе эксплуатации изделие из упорядоченного сплава подвергается различным деформационным воздействиям. Целью данной работы является изучение эволюции микроструктуры и анализ изменения физико-механических свойств в ходе пластической деформации атомно-упорядоченного сплава Cu-56 ат.% Au.

Слиток сплава диаметром 5 мм гомогенизировали при температуре 600°C в течение 3 часов, закаливали путем охлаждения в воде и разрезали на две части. Из одной части слитка методом волочения была получена проволока диаметром 1.5 мм для механических испытаний и тонкая проволока диаметром 0.25 мм для резистометрии. Другая часть слитка была прокатана до получения пластин толщиной 0.3 мм (для аттестации фазового состава) и фольг толщиной 80 мкм (для изучения микроструктуры). В работе исследовали образцы, находящиеся в двух исходных состояниях: атомно-упорядоченном и разупорядоченном.

В ходе исследования образцы сплава подвергались пластической деформации в интервале от 5 до 80%. Построены зависимости микротвердости и удельного электросопротивления в зависимости от степени пластической деформации упорядоченного и разупорядоченного сплава. Проведены механические испытания образцов в различных структурных состояниях, выполнен анализ их деформационного поведения с определением теоретического момента потери устойчивости пластического течения [2]. Установлено, что прочностные свойства исходно упорядоченного сплава ($\sigma_{0.2} = 736$ МПа) после пластической деформации на 20-30% резко возрастают ($\sigma_{0.2} = 964$ МПа). Предел текучести становится значительно выше по сравнению с сильно деформируемым разупорядоченным сплавом: $\sigma_{0.2} = 870$ МПа. Обнаружено, что под влиянием деформации в исходно упорядоченном сплаве сначала происходит разрушение c-доменной структуры, ламельная структура демонстрирует более высокую устойчивость к деформационным воздействиям. Показано, что деформация на 80% не приводит к полному разупорядочению, в сплаве формируется двухфазная структура (порядок+беспорядок). Сделан вывод, что умеренная пластическая деформация (на $\sim 20\%$) позволяет сформировать в исходно упорядоченном сплаве Cu-56 ат.% Au термически стабильное структурное состояние с повышенными прочностными свойствами и пониженным электросопротивлением [3]. Полученные результаты могут представлять интерес для практических приложений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 21-13-00135).

1. В.М. Малышев, Д.В. Румянцев, Золото. М.: Металлургия, 1979. 288 с.

2. О.В. Антонова *и др.*, Физика металлов и металловедение (принято в печать).

3. A.Yu. Volkov *et al.*, Materials Science and Engineering (submitted).

Переход полупроводник — металл и поглощение света в тонких плёнках диоксида ванадия

Я.Я. Пыжьянов[1,2*], А.В. Телегин[1], Е.В. Мостовщикова[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: pyzhyanov@imp.uran.ru

Наличие фазового перехода металл — полупроводник (ФПМП, $T_{кр} \sim 340$ К) и связанных с этим особенностей электрофизических свойств сделали диоксид ванадия VO_2 перспективным материалом для исследований и использования на практике [1]. Свойства VO_2 сильно зависят от степени окисления и дефицита по кислороду. В случае плёнок эти параметры определяются условиями синтеза, типом подложки, толщиной плёнки и т.д. [2,3].

Целью работы являлось определение особенностей оптических и электрических свойств плёнок VO_2, полученных методом химического осаждения из газовой фазы. Оптические измерения проводились с помощью призменного спектрометра в диапазоне длин волн $0.8 - 20$ мкм в области ФПМП. Для измерения электросопротивления была собрана схема на цифровых мультиметрах и написана программа в среде LabVIEW.

На Рис. 1a приведены спектры пропускания VO_2, которые формируются краем поглощения в области длин волн $\lambda < 1$ мкм, вкладом носителей заряда, примесей в интервале $1 - 10$ мкм и фононным спектром при $\lambda > 10$ мкм. Изменение температуры, а также параметров синтеза плёнок приводит к изменению формы спектра и величины коэффициента пропускания.

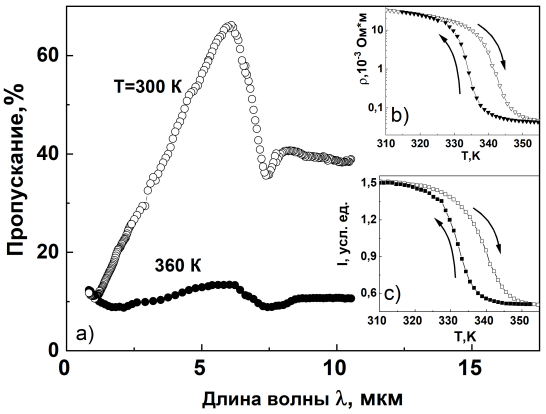


Рис. 1. a) Спектры пропускания t плёнки VO_2, b) и c) Температурные зависимости электросопротивления ρ и пропускания света I при длине волны 2.4 мкм.

При нагреве выше ФПМП пропускание образцов резко уменьшается, при этом электросопротивление падает на $3 - 4$ порядка (Рис.1b,c). Максимальные изменения величин и минимальную ширину гистерезиса проводимости и пропускания света при ФПМП демонстрируют плёнки, подвергаемые дополнительному отжигу. Внешнее магнитное поле до 1 Тл не влияет на проводимость и поглощение света в плёнках, что объясняется природой ФПМП, связанной со структурным переходом в VO_2. Таким образом, во всех образцах наблюдался оптический отклик на ФПМП, имеющий температурный гистерезис, связанный с гистерезисом электропроводимости при фазовом переходе. Отжиг плёнок VO_2 обеспечивает близкий к номинальному состав образцов. Природу примесных состояний плёнок VO_2 предполагается изучить в следующей работе при сравнительном анализе данных пропускания и отражения света.

Высокая чувствительность плёнок к изменению температуры может быть использована при создании контактных реле и бесконтактных оптоэлектронных сенсоров.

Работа выполнена в рамках госзадания Минобразования РФ №122021000036-3 «Спин».

1. А.А. Бугаев, Б.П. Захарченя, Ф.А. Чудновский, Фазовый переход металл — полупроводник и его применение. — Л.: Наука (1979).
2. L.V. Yakovkina, S.V. Mutilin, V.Ya. Prinz *et al.*, J. Mater Sci **52**, 4061 (2017).
3. A.M. Makarevich, I.I. Sadykov, D.I. Sharovarov *et al.*, J. Mater. Chem. C **3**, 9197 (2015).

Изменения зарядовой подсистемы в зависимости от типа антиферромагнитного упорядочения в двойных манганитах $Ln\mathrm{BaMn_2O_6}$ ($Ln = \mathrm{Nd_{1-x}Sm_x}$)

Я.Я. Пыжьянов[1,2*], Е.В. Мостовщикова[1], Е.В. Стерхов[3], С.Г. Титова[3]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[3]Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: pyzhyanov@imp.uran.ru

Двойные манганиты $Ln\mathrm{BaMn_2O_6}$, Ln — редкоземельные элементы, привлекают внимание из-за сильного увеличения температур фазового перехода (до комнатной и выше) по сравнению с манганитом «прародителем» типа $Ln_{0.5}\mathrm{Ba_{0.5}MnO_3}$, а также появления дополнительного орбитального и зарядового упорядочения [1]. В настоящее время поднимается вопрос о взаимосвязи между магнитными и структурными переходами, с одной стороны, и с переходами в состояние с зарядовым и/или орбитальным упорядочением, с другой, а также с изменениями в зарядовой подсистеме. Целью работы являлось изучение изменений в зарядовой подсистеме в области магнитных, структурных фазовых переходов и орбитального упорядочения манганитов $Ln\mathrm{BaMn_2O_6}$, $Ln = \mathrm{Nd_{1-x}Sm_x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$).

По результатам температурных измерений намагниченности M сделан вывод о зависимости температуры фазовых переходов от вида редкоземельного иона. Для $\mathrm{NdBaMn_2O_6}$ в области $278 - 288$ К наблюдается пик, связанный со структурным переходом и переходом металл-изолятор, и менее интенсивный пик при $\sim 230 - 245$ К связан с появлением антиферромагнитного упорядочения [2]. Для манганитов со смесью редкоземельных ионов $\mathrm{Nd_{1-x}Sm_x}$ охлаждение сначала приводит к появлению слабой особенности в зависимости $M(T)$ в области $400 - 320$ К (в зависимости от соотношения ионов Nd и Sm), которая связана с зарядовым/орбитальным упорядочением [3], а затем к увеличению M с максимумом в районе $250 - 270$ К вблизи T_N. При температуре ~ 200 К имеется ещё один переход, связанный с изменением типа зарядового/орбитального упорядочения [3]. Для манганита $\mathrm{SmBaMn_2O_6}$ по данным магнитных измерений $T_\mathrm{N} = 250 - 260$ К, а при 180 К происходит изменение типа орбитального упорядочения [3].

Измеренные температурные зависимости сопротивления $\rho(\mathrm{T})$ для образцов $\mathrm{Ln=Nd_{1-x}Sm_x}$ показывают полупроводниковую природу проводимости в диапазоне $50 - 350$ К и проявление зарядового упорядочения в виде излома кривой.

Для получения дополнительной информации об изменениях в зарядовой подсистеме были измерены зависимости пропускания света t от температуры T. Обнаружено, что в манганитах с $x = 0$, 0.25 и 0.5 магнитные и структурные переходы проявляются как переходы металл-изолятор или излом на кривой $t(T)$, соответственно. Для $\mathrm{Nd_{0.25}Sm_{0.75}}$ и Sm зависимости $t(T)$ имеют полупроводниковый характер, что согласуется с зависимостью $\rho(T)$. Стоит отметить, что в образцах с $\mathrm{Nd_{0.75}Sm_{0.25}}$, $\mathrm{Nd_{0.5}Sm_{0.5}}$ температурная область ниже структурного перехода соответствует металлическому характеру пропускания, хотя намагниченность значительно снижается. Это может быть связано с формированием антиферромагнитной структуры A-типа, для которой характерно ферромагнитное упорядочение внутри антиферромагнитно упорядоченных слоев. Ферромагнитное упорядочение в слое может приводить к появлению в нем металлической проводимости.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ 22-22-00507.

1. T. Nakajima *et al.*, J. Phys. Soc. Japan **72**, 3237 (2003).
2. S. Yamada *et al.*, Phys. Rev. B **95**, 035101 (2017).
3. T. Arima *et al.*, Phys. Rev. B **66**, 140408(R) (2002).

Ориентационные переходы в жидкокристаллической суспензии спиралевидных магнитных частиц при слабой сегрегации

Д.П. Сокольчик*, Д.В. Макаров

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия
*e–mail: dsokolchik@rambler.ru

Одним из актуальных направлений развития физики мягкой материи является синтез новых мягких магнитных материалов с заданными свойствами. Примером таких систем являются, в частности, различные суспензии на основе жидких кристаллов (ЖК). В зависимости от вида ЖК, являющегося основой магнитной суспензии, они могут обладать различной ориентационной структурой. Например, холестерические жидкие кристаллы, образованные хиральными молекулами, имеют винтовую надмолекулярную структуру. Добавление в такую ЖК-матрицу примесных анизометричных частиц позволяет приготовить жидкокристаллическую суспензию, обладающую спиральной структурой [1]. Аналогичная ориентационная структура может быть вызвана и спиралевидными частицами, внедренными в нематический жидкий кристалл [2], для которого в отсутствие внешних полей и ограничивающих поверхностей свойственна однородная ориентационная структура.

В данной работе теоретически исследуется суспензия спиралевидных магнитных частиц на основе нематического ЖК. Предложено феноменологическое описание [3] такой суспензии с учетом дополнительного вклада, учитывающего наличие хиральных коллоидных частиц. Сцепление между жидкокристаллической и магнитной подсистемами предполагалось планарным. Путем минимизации функционала полной свободной энергии получены уравнения ориентационного равновесия суспензии при наличии внешнего однородного магнитного поля. Основному состоянию хирального ферронематика отвечает геликоидальная ориентационная структура полей директора и намагниченности. Приложение магнитного поля перпендикулярно оси этой спиральной структуры приводит к её раскручиванию. Проанализированы случаи однородного распределения магнитной примеси по объёму, а также слабой её сегрегации. Оказалось, что в приближении однородного распределения спиральных частиц хиральный ферронематик ведёт себя аналогично феррохолестерику [4] при соответствующей перенормировке у них параметра хиральности (волнового числа невозмущенной спирали). В приближении слабой сегрегации примеси численно получены поля перехода системы в раскрученную фазу и зависимость шага спиральной структуры от напряженности поля. Показано, что при слабой магнитной сегрегации спиральных частиц происходит повышение полей перехода в раскрученную фазу по сравнению с бессегрегационным случаем, причем более сильное, чем повышение критических полей для феррохолестерического ЖК при аналогичных условиях.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (проект № FSNF-2020-0008).

1. P. M. Rupnik, D. Lisjak, M. Copic et al. Science Advances. **3**, e1701336 (2017).

2. B. Senyuk, M. B. Pandey, Q. Liu et al. Soft Matter. **11**, 8758–8767 (2017).

3. S. V. Burylov, Y. L. Raikher. Molecular Crystals and Liquid Crystals. **258**, 107–122 (1995).

4. A.N. Zakhlevnykh, P.A. Sosnin, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **146**, 103–110 (1995).

Изучение критических точек и электронной структуры системы Cu_xZrSe_2 с применением метода ЭДС

Е.А. Суслов[1,2*], М.С. Постников[1,3], А.А. Титов[1,4], А.Н. Титов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский государственный аграрный университет, Екатеринбург, Россия
[3]Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия
[4]Уральский государственный экономический университет, Екатеринбург, Россия
*e–mail: suslov-ea@mail.ru

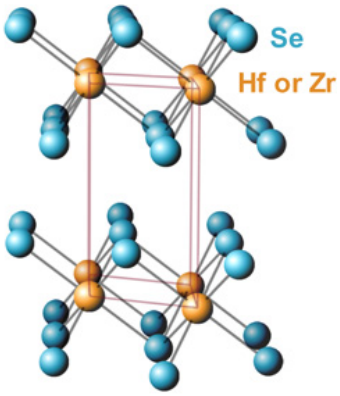


Рис. 1. Кристаллическая решетка $HfSe_2$ и $ZrSe_2$.

Слоистые дихалькогениды переходных металлов (в частности $ZrSe_2$) представляют интерес из-за своей структуры (рис. 1). Между сэндвич-слоями таких структур имеются позиции, которые доступны для интеркаляции атомов различных металлов или молекул. При этом свойства полученных новых материалов будут отличаться от свойств матрицы. Изучение электронной структуры и критических точек таких систем возможно с помощью спектральных и структурных методов, однако в работах [1, 2] приводится обоснование применения метода ЭДС при изучении электронной структуры слоистых дихалькогенидов, интеркалированных различными металлами.

В системе Cu_xZrSe_2 медь достаточно подвижна, и это даёт возможность производить интеркалацию при низких температурах вплоть до комнатной. В том числе в электрохимических ячейках вида $Cu|Cu^+|ZrSe_2$. Рентгенограммы Cu_xZrSe_2 в интервале содержаний меди $0.05 \leqslant x \leqslant 0.3$ индексируются в группе тригональной сингонии. В интервале $0 < x < 0.2$ с ростом x атомы меди частично переходят из тетраэдрических в октаэдрические позиции. При составах с $x > 0.2$ увеличивается заполнение тетраэдрических позиций атомами меди, а октаэдрические позиции опустошаются.

Для системы Cu_xZrSe_2 интерес представляют фазовые границы и переходы в диапазоне $0 \leqslant x \leqslant 1$. Также не ясен характер химической связи меди с матрицей $ZrSe_2$. Электрохимические исследования могут пролить свет на этот вопрос.

Для изучения этой системы была изначально синтезирована матричная фаза из элементов по точным навескам в вакууммированных ампулах. Далее были синтезированы составы заданного стехиометрического состава из металлической меди и матричной фазы $ZrSe_2$. Синтез этих образцов проводился в вакууммированных ампулах при комнатной температуре. Для электрохимических измерений образцы были измельчены в шаровой мельнице до размера 20 нм. Электродный материал готовился из порошков Cu_xZrSe_2, ПВДФ и сажи (45С) в соотношении 85:10:5 масс. % соответственно. Для кулонометрического титрования были использованы электрохимические ячейки $Cu|Cu^+|Cu_xZrSe_2$. 0.1М раствор CuI в безводном ацетонитриле (CH_3CN) послужил электролитом. В качестве опорных составов были выбраны $ZrSe_2$ и Cu_xZrSe_2. Поиск критических точек был проведен методом кулометрического титрования с последующей выдержкой для достижения равновесного состояния.

Работа выполнена за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00361).

1. A.S. Shkvarin *et al.*, RSC Advances **6**, 106527 (2016).
2. E.A. Suslov *et al.* J. Phys. Chem. A **125**, 1981 (2021).

Изучение электронной структуры и критических точек системы Ni_xTiSe_2 методом ЭДС

Е.А. Суслов[1,2*], М.С. Постников[1,3], С.В. Сумников[4], А.Н. Титов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский государственный аграрный университет, Екатеринбург, Россия
[3]Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия
[4]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*e–mail: suslov-ea@mail.ru

Слоистые дихалькогениды переходных металлов (в частности $TiSe_2$) интересны из-за своей слоистой структурой и слабой Ван-дер-Ваальсовой связи между слоями, так как существует возможность обратимо интеркалировать различные атомы других металлов между их слоями. При этом полученные новые материалы будут иметь отличные от матрицы свойства. Изучение электронной структуры и критических точек таких систем возможно с помощью спектральных и структурных методов, однако в работах [1, 2] приводится обоснование применения метода ЭДС при изучении электронной структуры слоистых дихалькогенидов титана, интеркалированных различными металлами.

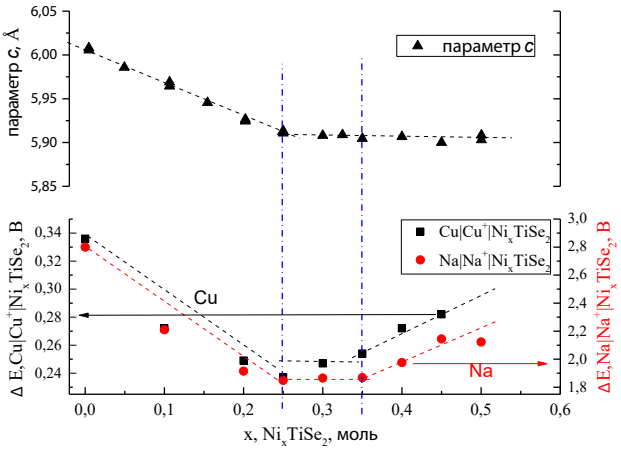


Рис. 1. Зависимости параметра решетки с и ЭДС электрохимических ячеек от x в Ni_xTiSe_2.

Для системы Ni_xTiSe_2 были измерены параметры решетки для разных составов, а также определена зависимость значения ЭДС для электрохимических ячеек $Cu|Cu^+|Ni_xTiSe_2$ и $Na|Na^+|Ni_xTiSe_2$ (см. Рис. 1). Такие измерения можно проводить относительно металлов с высокой подвижностью, но провести измерения относительно $Ni|Ni^{2+}|Ni_xTiSe_2$ не представляется возможным в виду низкой диффузии никеля и в следствии этого длительного времени достижения равновесия в системе.

Для изучения электронной структуры системы Ni_xTiSe_2 были синтезированы составы с разным содержанием никеля ($0 \leqslant x \leqslant 0.5$, $\Delta x = 0.1$), и использованы электрохимические ячейки $Na|Na^+|Ni_xTiSe_2$ с 1М раствором $NaClO_4$ в PC:EC:DMC.

В результате кулометрического титрования с последующей выдержкой были получены разрезы с фиксированным содержанием натрия и различным содержанием никеля (например, $Na_{0.1}Ni_xTiSe_2$). Удалось установить, что при внедрении никеля сильно упрощается вид фазовой диаграммы. Вероятно, это связано с тем, что никель создает взаимодействия, которые сильнее тех, что создает натрий. Так же по результатам измерений можно высказать предположение, что внедрении никеля в систему меняется заполненность уровня Ферми. А при добавлении натрия атомы никеля переходят из октаэдрических позиций в тетраэдрические. Это происходит при составах Ni_xTiSe_2, где $x = 0.2 - 0.25$.

Работа выполнена за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 21-12-00261).

1. A.S. Shkvarin *et al.*, RSC Advances **6**, 106527-106539 (2016).
2. E.A. Suslov *et al.*, The Journal of Physical Chemistry A **125** (9), 1981-1986 (2021).

Исследование плоскостной анизотропии в трехслойной структуре Co/Cu/Co

Р.А. Сухачев*, М.В. Мамонова

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

*e–mail: sukhachevruslan@gmail.ru

Многие исследования особенностей сверхтонких пленок сосредоточены на изучении фундаментальных физических аспектов магнетизма. Однако у них есть и большой потенциал для практического применения [1]. Тонкие магнитные пленки широко используются в устройствах микроэлектроники, наноэлектроники и спинтроники. Их использование в запоминающих устройствах, позволяет получить высокую плотность и скорость записи информации. В данной работе проведены численные исследования энергетических и магнитных свойств системы Co/Cu/Co с использованием пакета программ VASP [2]. Параметр дельта — параметр магнитной анизотропии расчитывался исходя из следующего выражения $\Delta_{||} = (E_{||} - E_{\perp})/E_{||}$, где $E_{||}$ и $E_{\perp}$ — полные энергии системы в зависимости от направления магнитных моментов, в плоскости пленки и перпендикулярно ей. $E_{\text{ma}} = E_{||} - E_{\perp}$ — энергия магнитной анизотропии. Исследование значения параметра плоскостной анизотропии (Рис. 1), в зависимости от количества слоев магнитного материала кобальта, нашли хорошее согласование с экспериментальными данными [3].

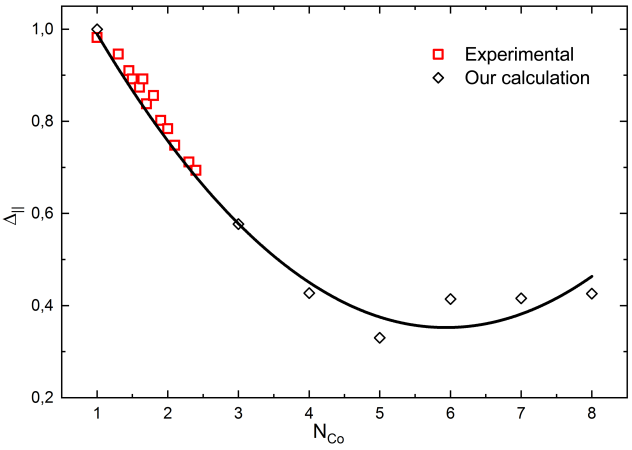


Рис. 1. Зависимость параметра анизотропии от количества монослоев кобальта. $\Delta_{||}(N_{\text{Co}})_{\text{experimental}}$ — экспериментальная плоскостная анизотропия.

Таблица 1. Полные энергии для системы Co/Cu/Co для граней 100, 110 и 111.

Faces	$E_{||}$, eV	$E_{\perp}$, eV	E_{ma}, meV
100	−22.717099	−22.716201	0.898
110	−21.663702	−21.663726	−0.024
111	−23.282756	−23.281794	0.961

В Таблице 1 приведены вычисления, описывающие влияние ориентации поверхностной грани на энергию магнитной анизотропии. Они показали, что для граней (100) и (111) наиболее энергетически выгодным является направление магнитных моментов параллельно плоскости пленки. Для грани (110) была получена слабая перпендикулярная магнитная анизотропия.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002).

1. J.W. Nielsen, Annu. Rev. Mater. Sci. **9**, 87 (1979).

2. P.G. Kresse, J. Furthmuller. Phys. Rev. **54**, 11169 (1996).

3. F. Huang, M. T. Kief, G. J. Mankey, R. F. Willis. Phys. Rev. **49**, 3962 (1994).

Исследование однокомпонентной системы Леннард-Джонса при низких скоростях охлаждения методами молекулярной динамики и регрессионного анализа

А.Р. Фархутдинов*, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
*e–mail: farhutdinovalbert@yandex.ru

Скорость охлаждения γ, используемая при моделировании процессов охлаждения системы классическими методами молекулярной динамики, обычно составляет порядка 10^{12} К/с. Однако, максимальные экспериментально измеренные скорости охлаждения γ не превышают значений порядка 10^8 К/с. Таким образом, классические методы оказываются неэффективными при моделировании системы в условиях эксперимента. Целью данной работы является разработка методики, позволяющей предсказать характеристики системы в будущие моменты времени на основе результатов относительно небольшого числа итераций моделирования процесса охлаждения при условиях, близких к реальным.

Рассматривается система из $N = 1372$ частиц, взаимодействие между которыми описывается потенциалом Леннард-Джонса [1]:

$$U_{LJ}(r_{ij}) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right], \tag{1}$$

где r_{ij} — расстояние между частицами i и j. Температура системы меняется в диапазоне от $1.3\varepsilon/k_B$ до $10^{-4}\varepsilon/k_B$. Плотность системы $\rho \approx 0.75\sigma^{-3}$ поддерживается постоянной. Интегрирование уравнений движения осуществляется с помощью скоростного алгоритма Верле [2] с временным шагом $\Delta t = 0.005\tau = 0.005\sigma\sqrt{m/\varepsilon}$, где m — масса частицы. Скорость охлаждения γ принимает значение $\gamma = 4 \times 10^{-4}\varepsilon/k_B\tau \sim 10^{10}$ К/с.

Для некоторых температур из указанного диапазона вычислялась функция радиального распределения частиц [3]:

$$g(\mathbf{r}) = \frac{2V}{N^2}\left\langle \sum_{i=1}^{N-1}\sum_{j>i}^{N}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_{ij}\right)\right\rangle. \tag{2}$$

Полученные структурные характеристики использовались в качестве тренировочных данных при обучении регрессионных моделей, лежащих в основе методики, представленной в работе.

На примере системы Леннард-Джонса показано, что оригинальная методика позволяет восстановить интересующие состояния системы с заданной температурой T_2, идентичные получаемым при охлаждении с произвольно заданными скоростями, начиная с температуры T_1, не прибегая к моделированию такого охлаждения на всём диапазоне температур $[T_1; T_2]$.

Работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 20-1-2-38).

1. J.E. Jones, Proc. R. Soc. Lond. A. **106**, 441 (1924).
2. W.C. Swope *et al.*, J. Chem. Phys. **76**, 637 (1982).
3. D.C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation. — Cambridge.: Cambridge University Press (2004).

Семейство сферически-симметричных потенциалов для описания взаимодействия молекул воды

Р.А. Хабибуллин*, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
*e–mail: px@kpfu.ru

К настоящему времени предложено множество модельных потенциалов для описания взаимодействия молекул воды. Атомистические модели, такие как SPC/E [1, 2] и TIP4P/2005 [3], повторяют геометрию молекулы воды и предполагают учет взаимодействий отдельных атомов, что позволяет добиться высокой точности в воспроизведении различных физических свойств и аномалий. Существуют также и крупнозернистые (одноатомные) потенциалы [4, 5], которые обеспечивают более высокую производительность в численном моделировании, не уступая при этом в точности атомистическим моделям. С учетом данного обстоятельства закономерно возникает следующий вопрос: насколько можно упростить описание межмолекулярного взаимодействия для воды, сохранив при этом точность воспроизведения физических свойств? Чтобы на него ответить, мы исследовали наиболее простую из возможных форм межчастичных потенциалов — сферически симметричные потенциалы взаимодействия.

При помощи оригинального метода восстановления потенциалов межчастичного взаимодействия по структурным данным, реализованного на основе машинного обучения [6], было получено семейство из 13 эффективных парных потенциалов для различных температур вдоль изобары $P = 1$ атм. Данные термодинамические состояния соответствуют жидкой фазе воды вблизи кривой плавления. Восстановление потенциалов выполнялось по экспериментальным функциям радиального распределения $g(r)$ [7]. Полученное семейство может быть представлено выражением

$$u(r) = k(r) \cdot T + b(r), \tag{1}$$

где $k(r) \cdot T$ — вклад, зависящий от температуры, $T \in [254; 366]$ К.

Для проверки применимости восстановленных потенциалов были рассчитаны структурные (функции радиального распределения, температурная зависимость равновесной плотности) и транспортные характеристики (температурные зависимости коэффициента самодиффузии, вязкости, коэффициента теплопроводности) на основе результатов молекулярно-динамического моделирования. Полученные значения сопоставлены с известными экспериментальными данными [8, 9].

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030». Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета.

1. H.J.C. Berendsen, J.R. Grigera, T.P. Straatsma, J. Phys. Chem. **91**, 6269 (1987).
2. S. Chatterjee *et al.*, J. Chem. Phys. **128**, 124511 (2008).
3. J.L.F. Abascal, C. Vega, J. Chem. Phys. **123**, 234505 (2005).
4. V. Molinero, E.B. Moore, J. Phys. Chem. B **113**, 4008 (2009).
5. H. Chan *et al.*, Nat. Commun. **10**, 379 (2019).
6. R. Storn, K. Price, J. Glob. Optim. **11**, 341 (1997).
7. L.B. Skinner, C.J. Benmore *et al.*, J. Chem. Phys. **141**, 214507 (2014).
8. J.V. Sengers, J.T.R. Watson, J. Phys. Chem. Ref. Data **15**, 1291 (1986).
9. M. Holz *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys. **2**, 4740 (2000).

Процессы структурообразования в фуллереновых смесях

Р.Р. Хайруллина[1]*, Р.М. Хуснутдинов[1,2]

[1]Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
[2]Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
*e–mail: raniya-art@mail.ru

Процессы стеклообразования в конденсированных средах характеризуются некоторыми специфическими изменениями ближнего порядка [1] в расположении частиц (атомов/молекул/ионов). Так, ближний структурный порядок в переохлажденных жидкостях и стеклах характеризуется пятилучевой симметрией в расположении частиц часто обозначаемый как икосаэдрический (идеальный или искаженный) ближний порядок. Настоящая работа посвящена исследованию локальных структурных особенностей переохлажденного расплава фуллереновой смеси $A_{20}B_{80}$ (где A=C_{60} и B=C_{70}), полученного при различных протоколах охлаждения ($\gamma = 10^{10}$, 10^{12}] K/c) с целью выяснить механизм формирования икосаэдрического ближнего порядка в бинарных молекулярных жидкостях. Проведены комплексные исследования свойств расплава фуллереновой смеси с использованием крупномасштабного молекулярно-динамического моделирования с последующим структурным и кластерным анализом. Установлено, что доля искаженных икосаэдрических кластеров в переохлажденном растворе смеси фуллеренов $A_{20}B_{80}$ (где A=C_{60} и B=C_{70}) составляет $\eta = 19.4\%$, в то время, как в кристаллической фазе их составляет не более 4.5%. Определена температура фазового перехода «жидкость-кристалл» и критическая температура стеклования, которые составили $T_m^* = 0.465$ и $T_C^* = 0.401$, соответственно.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-22-00508).

1. R.M. Khusnutdinoff *et al.*, J. Phys.: Condensed Matter. **34**, 365403 (2022).

Исследование влияния дефектов различных типов на эффекты гистерезиса в мультислойных наноструктурах

Р.С. Шакиров*, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия
*e–mail: red-srar@bk.ru

Исследование гистерезисных эффектов [1] в мультислойных структурах, состоящих из сверхтонких ферромагнитных пленок, которые разделены немагнитным металлом, имеют высокую актуальность. Подобные структуры хорошо себя показывают в устройствах хранения информации. Актуальной целью исследований является введение контролируемого беспорядка [2] в систему, для получения контроля над процессами перемагничивания в ферромагнитных материалах.

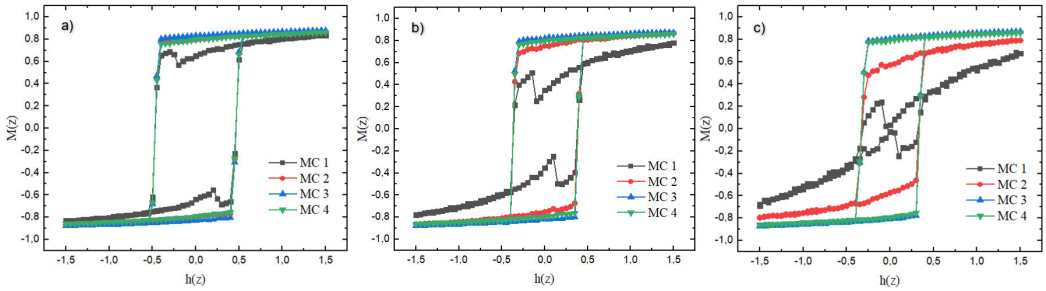


Рис. 1. Результаты моделирования системы с точечными дефектами при значениях спиновой концентрации a) $p_1 = 0.75$, $p_2 = 0.90$, b) $p_1 = 0.50$, $p_2 = 0.75$, c) $p_1 = 0.35$, $p_2 = 0.60$ при толщине пленок равным N = 4 МС.

В данной работе было проведено методами компьютерного моделирования исследование влияния точечных дефектов на магнитные свойства мультислойных наноструктур, при помощи алгоритма односпиновых переворотов Метрополиса. Исследуемая модель состоит из двух ферромагнитных пленок размером $L \times L \times N$ с толщинами $N = 3 - 7$ монослоя (МС) описываемой анизотропной моделью Гейзенберга. Параметры моделирования задаются в единицах обменного интеграла внутрислоевого взаимодеиствия J_1 = 1, а значение интеграла межслоевого взаимодействия $J_2 = -0.3\ J_1$, при значении температуры $T = 0.8\ J_1/k_B$. В данную модель были введены дефекты, представляющие собой немагнитную примесь, введеные в качестве параметра спиновой концентрации p в первых слоях каждой пленки p_1 и во вторых слоях p_2. В остальных слоях спиновая концентрация p = 1, так как в них отсутствуют дефекты. В моделировании использовались следующие конфигурации a) слабоупорядоченная конфигурации $p_1 = 0.75$, $p_2 = 0.90$, b) промежуточная конфигурации $p_1 = 0.50$, $p_2 = 0.75$ и c) сильно неупорядоченная конфигурации $p_1 = 0.35$, $p_2 = 0.60$, значения которых близки к порогу перколяции.

Было показано, что при $N = 4$ МС появляется скачкообразное изменение намагниченности, из-за создания отдельных кластеров, которым требуется куда большие поля для перемагничивания, по сравнению для систем без дефектов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (договор 0741-2020-0002).

1. M. Bersweiler et al., Phys. Rev.B. **92**, 224431 (2015).
2. M.S. Pierce et al ., Phys. Rev. Let. **94**, 017202 (2005).

Численное исследование эффектов старения в тонких гейзенберговских пленках

М.А. Шляхтич[1,2*], П.В. Прудников[2]

[1]Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия
[2]Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия
*e–mail: mshlyakhtich@sfu-kras.ru

В данной работе были исследованы тонкие ферромагнитные пленки с гамильтонианом Гейзенберга $H = -J\sum\limits_{i,j}^{N_s}\left[(1-\Delta(N))\left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y\right) + S_i^z S_j^z\right]$, где $J > 0$ константа ферромагнитного обменного взаимодействия; $\Delta(N)$ — константа анизотропии; $\Delta = 0$ соответствует изотропному случаю Гейзенберга; $\Delta = 1$ — случай Изинга. Моделирование проводилось с использованием алгоритма Метрополиса для систем размером $N_s = N \times L \times L$, где N — число слоев в пленке, а $L = 128$ линейный размер слоя. Моделирование проводилось при критической температуре $T_C = 1.15$ J/k для $N = 3$ монослоя (МС), $T_C = 1.31$ J/k для $N = 5$ МС, $T_C = 1.39$ J/k для $N = 7$ МС [1-3] и различных начальных состояниях $m_0 = 1$, $m_0 = 0.0001 \ll 1$.

Для изучения явлений старения были рассчитаны временные зависимости двухвременных автокорреляционных функций

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N_s}\sum_i \mathbf{S}_i(t)\mathbf{S}_j(t_w) \right\rangle - m(t)\cdot m(t_w), \qquad (1)$$

t_w — время ожидания, т.е. время, прошедшее с момента приготовления образца до начала измерения величины; $m(t)$ — намагниченность, которая является параметром порядка для ферромагнитной пленки. Были получены временные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ в зависимости от времени наблюдения $t - t_w$ для различных значений времени ожидания $t_w = 200, 100, 70, 50, 20, 0$ шагов Монте-Карло за спин (MCS/s).

В критическом поведении тонких гейзенберговских пленок проявляются эффекты старения. На это указывает временное поведение автокорреляционной функции. С увеличением времени ожидания t_w происходит замедление процессов релаксации в системах. В данной работе была проведена оценка времени корреляции. Увеличение возраста системы t_w приводит к увеличению значения времени корреляции τ_{cor}. Величина τ_{cor} демонстрирует наличие эффектов старения в тонких гейзенберговских пленках.

При уменьшении размеров магнитных систем происходит усилением флуктуаций спиновой плотности и проявляются эффектов критического замедления. Таким образом эффекты старения проявляются в неравновесном поведении низкоразмерных магнитных систем.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (договор 0741-2020-0002). Вычислительные исследования поддержаны за счет ресурсов, предоставленных Центром коллективного обслуживания «ЦОД ДВО РАН» (Хабаровск).

1. П.В. Прудников, В.В. Прудников, М.А. Медведева, Письма в ЖЭТФ **100**, 501 (2014).
2. P.V. Prudnikov, M.A. Menshikova et al., JMMM **387**, 77 (2015).
3. M.A. Medvedeva, P.V. Prudnikov, J. Phys.: Conf. Ser. **510**, 012024 (2014).

Фрустрированные фазовые состояния и псевдокритические свойства низкоразмерной модели Изинга с заряженными примесями

Д.Н. Ясинская*, Ю.Д. Панов

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: daria.iasinskaia@urfu.ru

Низкоразмерные системы изинговских спинов широко используются для описания многих реальных магнитных материалов [1]. Присутствие в системе анизотропии и фрустрации приводит к наличию богатых фазовых диаграмм и к таким необычным явлениям как магнитные плато, квазифазы и псевдопереходы, а также усиление магнитокалорического эффекта.

Работа посвящена изучению фазовых, критических и магнитных свойств одномерной и квазиодномерной моделей изинговских спинов $s = 1/2$ с заряженными примесями, заряд которых описывается псевдоспином $S = 1$. Гамильтониан системы включает одноузельное заряд-зарядовое взаимодействие Δ, межузельное заряд-зарядовое взаимодействие $V \geqslant 0$, обменное взаимодействие спинов J, а также внешнее магнитное поле h:

$$H = \sum_i (\Delta S_{i,z}^2 + V S_{i,z} S_{i+1,z} + J P_{i,0} s_{i,z} s_{i+1,z} P_{i+1,0} - h P_{i,0} s_{i,z} - \mu S_{i,z}),$$

где $P_0 = 1 - S_z^2$ - оператор проектирования на магнитные состояния со спином $s = 1/2$. С помощью химического потенциала мы фиксируем плотность суммарного заряда примесей в системе: $nN = \sum_i S_{iz} = \text{const}$.

С помощью метода трансфер-матрицы мы изучили свойства основного состояния системы, построили фазовые диаграммы и обнаружили большое разнообразие фрустрированных фаз с различной структурой и остаточной энтропией. Анализ энтропии на границах разделения фаз показал наличие так называемых псевдопереходов. В случае $n = 0$ были обнаружены псевдопереходы «1 рода», характеризующиеся тем, что величины, связанные с первыми производными термодинамического потенциала демонстрируют резкий скачок, напоминающий разрывы при фазовых переходах первого рода. Тогда как вторые производные демонстрируют сильные острые пики. Полученные псевдокритические индексы для псевдопереходов совпадают с ранее установленными результатами для других одномерных моделей [2] и составляют $\alpha = 3$, $\nu = 1$ и $\gamma = 3$. Однако в случае $n \neq 0$ мы наблюдаем псевдопереход «2 рода», который ранее не был обнаружен в низкоразмерных магнетиках. Первые производные термодинамического потенциала имеют характерный перегиб, тогда как вторые производные испытывают резкий конечный скачок, напоминающий разрыв при фазовых переходах 2 рода. Тем не менее, теорема Перрона-Фробениуса не нарушается, и настоящий фазовый переход происходит только при $T = 0$.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС», а также Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект FEUZ-2020-0054.

1. W.X. Zhang *et al.*, RSC advances **3**, 3772 (2013).

2. Y. Panov, O. Rojas, Phys. Rev. E. **103**, 062107 (2021).

Проводимость и транспортные явления

Жидкость Латтинджера с притяжением и одной примесью: точное решение

В.В. Афонин
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
e–mail: vasili.afonin@mail.ioffe.ru

Прогресс в теории, описывающей транспортные свойства одномерного баллистичекого канала с учетом электрон-электронного взаимодействия ($e-e$), в значительной степени был обусловлен тем, что задача в этом случае является точно решаемой. Однако, почти сразу стало ясно [1], что даже упругое примесное рассеяние (рассеяние назад) кардинально меняет картину транспортых явлений в одномерных проводниках. Простейшей задачей с примесным рассеянием является баллистический канал с имплантированной точечной примесью. В рамках имеющихся на сегодня представлений такая задача уже не может быть решена точно. Для ее решения требуется использовать подходы, развитые при построении теории сильновзаимодействующих элементарных частиц.

В докладе обсуждается точное решение для задачи рассеяния одномерных притягивающихся и однокомпонентных фермионов на точечной примеси, существующее в модели Кейна-Фишера (принебрегающей существованием прошедшей волны: $\Psi_R^\dagger(0)\Psi_L(0)+hc$) при параметре Латтинжера $g=2$ (сильное e-e взаимодействие, притяжение). До настоящего времени обсуждалось только точное решение при $g=1/2$ [1] (дуальность этих двух задач не доказана, а их гамильтонианы не переходят друг в друга при $g\to 1/g$ [2]). С помощью прямого аналитического расчета в [3] было показано, что точное решение при $g=2$ приводит к расходящемуся в ультрафиолетовой области коэффициенту отражения электронов от примеси, поэтому он нуждался в процедуре ренормировки [4]. Ренормировка выражения для кондактанса по Гелл-Манну — Лоу приводит к линейной зависимости ответа от частоты внешнего поля (ω):

$$|G_\omega|^2=\frac{e_0^2}{\pi}\frac{|\omega|}{M_{\rm ren}} \tag{1}$$

при любой силе электрон-примесного рассеяния (здесь $M_{\rm ren}$-параметр ультрафиолетового обрезания). Он не может быть получен экстраполяцией ответа для слабого ($g-1\ll 1$) $e-e$ взаимодействия (последняя привела бы к зависимсти ω^2). Физической причиной изменения частотной зависимости кондактанса является отсутствие закона сохранения энергии при упругом рассеянии электронов на примеси в области очень малых времен ($\sim 1/M_{\rm ren}$), т.е. на таких временах, на которых величина энергии плохо определена. Ответ (1) находится в соответствии с предсказаниями работы [5], полученным из другой модели (со сшивкой нелинеаризованного уравнения Шредингера в точке расположения примеси), в случае слабого электрон-примесного и произвольного $e-e$ взаимодействия.

1. C.L. Kane and M.P.A. Fisher, Phys. Rev. B **46**, 15233 (1992).
2. В.В. Афонин и В.Ю. Петров, Письма в ЖЭТФ **109**, 797 (2019).
3. В.В. Афонин, принята в ЖЭТФ.
4. Murray Gell-Mann and F.E. Low, Phys. Rev. **95**, 1300 (1954).
5. В.В. Афонин и В.Ю. Петров, Письма в ЖЭТФ **97**, 587 (2013).

О точном решении для одномерного проводящего канала с примесью

В.В. Афонин*, В.Ю. Петров

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
*e–mail: vasili.afonin@mail.ioffe.ru

Причина, по которой взаимодействие одномерных электронов ($-$) с линейным спектром без рассеяния назад (латтинжеровкая жидкость) оказывается аномально сильным, состоит в том, что в пакеты, созданные из таких электронов, не расплываются. Отсюда следует, что: i) два электронных пакета, двигающихся в одном направлении, все время сильно взаимодействуют друг с другом; ii) любое возбужденное состояние с данной энергией может быть представлено в виде большого числа различных пакетов, состоящих как из четного числа (бозе-частицы), так и из нечетного числа электронов (фермионы). Поэтому гамильтониан Кейна-Фишера ($V_{\rm imp}(\Psi^\dagger_R(0)\Psi_L(0)+hc)$), имеющий точное решение при параметре Латтинжера $g=1/2$ [1] (сильное $-$ взаимодействие, точечная примесь, отталкивание), может быть переписан в различных представлениях. Нам будет удобно записать его в терминах нормальных возбуждений [2], определяя их как $\chi(x)|\Omega>=0$, где $|\Omega>$-волновая функция основного состояния без примеси, известная как в представлении исходных электронов, так и в бозонном представлении [3]. Поля $\chi(x)$ представляют из себя свободные фермионы, имеющие электрический заряд, равный $\sqrt{g}e_0$. Учет примесного рассеяния приводит к точно решаемому гамильтониану полей $\chi(x)$, *не сохраняющему электрический заряд*:

$$H=v_c\int dx\hat{\chi}^\dagger(x)i\partial_x\hat{\chi}_(x)+V_{\rm imp}\sqrt{\exp(\gamma_E)M/2\pi}\left[\hat{\chi}^\dagger(x=0)+\hat{\chi}_(x=0)\right]. \qquad (1)$$

Это означает, что рассеяние квазичастиц на примеси может происходить только при участии основного состояния. Ультрафиолетовое обрезания (M) возникает из-за непременимости одномерных выражений (в том числе и исходного гамильтониана) на масштабах порядка размера примеси (где электроны трехмерны) и в переходной области. Точное выражение для кондактаса ($G(\omega)$), следующее из (1), пропорционально $|\omega|^{-1}(\mathrm{arctg}(|\omega|/\mu)|_{\omega\to 0}-\mathrm{arctg}(|\omega|/\mu))$. Это выражение растет как $(\omega/\mu)^2$ и совпадает с экстраполяцией ответа для слабого $-$ взаимодействия в область $g=1/2$ (в соответствии с результатом работы [1]). Однако, решение, полученное из (1), справедиво только вдали от примеси (с момента отражения электрона от примеси должно пройти время $t\gg 1/M;\hbar=1$). До этого идет переходная область, в которой этот ответ будет описываться одномерной теорией только по порядку величины (и то только тогда, когда ответы не расходятся на ультрафиолете). В трехмерной области $-$ взаимодействие слабое, и поэтому она не может давать вклада в частотнозависящий кондактанс. При $g=1/2$ аналитическое выражение для кондактанса сходится. Все это дает возможность написать оценку $G=e_0^2V_{\rm imp}^2{\rm c}|\omega|/\mu$ (здесь ${\rm c}\sim 1$), дающую самую медленную асимптотику по частоте. Таким образом, несмотря на отсутствие точной дуальности, частотная зависимость и физическая причина изменения асимптотики кондактанса теорий с притяжением и отталкиванием одинакова. (В обоих случаях он определяется областью $t\sim 1/M$, где энергия электронов плохо определена.)

1. C.L. Kane and M.P.A. Fisher, Phys. Rev. B **46**, 15233 (1992).

2. В.В. Афонин и В.Ю. Петров, Found. Phys. **40**, 190 (2018).

3. В.В. Афонин и В.Ю. Петров, ЖЕТФ **134**, 637 (2008).

Влияние засветки на электропроводность в топологическом изоляторе на основе квантовой ямы теллурида ртути

А.А. Галиуллин[1]*, О.А. Соболевский[2], Н.Н. Михайлов[3], С.А. Дворецкий[3], А.Ю. Кунцевич[2]

[1]Высшая школа экономики, факультет физики, Москва, Россия
[2]Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
[3]Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова, Новосибирск, Россия
*e–mail: 1233550v@mail.ru

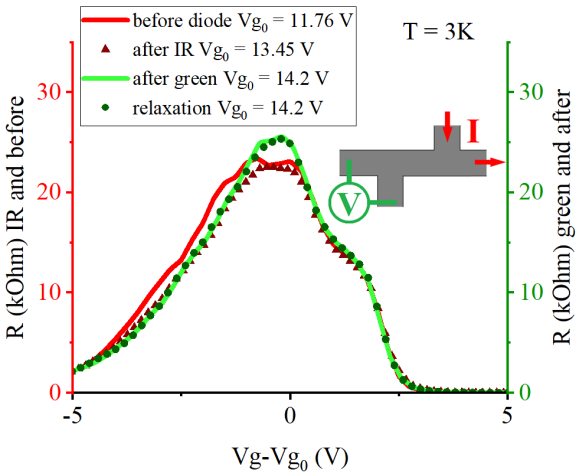


Рис. 1. Графики зависимостисопротивления $R = V/I$ от приведённого напряжения назатворе (Vg_0 — положение пика зависимости $R(Vg)$), измеренные после освещения образца различными светодиодами (IR — инфракрасный и green — зелёный). Подписи цветовой легенды расположены сверху вниз в хронологическом порядке измерений. Засветки проводились между измерениями.

Квантовые ямы теллурида ртути (КЯ HgTe) — наиболее гибкая и практичная платформа для реализации различных электронных топологических фаз [1]. Изменение концентрации носителей заряда в таких ямах при низких температурах может быть осуществлено путем временной засветки квантовой ямы оптическим излучением [2]. Общепринято, что такая засветка перезаряжает донорные и акцепторные центры, расположенные на дефектах, находящихся в барьерных и других вспомогательных слоях гетероструктуры, таким образом меняя концентрацию в яме. В данной работе демонстрируется нерелаксирующее влияние засветки различной длины волны на нелокальный перенос заряда в топологическом изоляторе на основе КЯ HgTe толщиной 7.6 нм. Для измерений использовался сухой криостат mini-CFMS с прикреплёнными у образца инфракрасным (IR) и зелёным (green) светодиодами. Нелокальная геометрия измерений показана на вставке к рис. 1. Для управления концентрацией зарядов в квантовой яме, использовался алюминиевый затвор толщиной 200 нм, полностью покрывающий измеряемую структуру и отделённый от неё диэлектрическим слоем парилена толщиной порядка микрона. Концентрация носителей заряда при нулевом напряжении на затворе до засветок составляла $0.2 \cdot 10^{12}$ см$^{-2}$, подвижность соответственно $7 \cdot 10^3$ см^2/(В·с).

Изменение формы зависимости $R(Vg)$ при освещении структуры различными длинами волн свидетельствует о наличии способа контролируемо изменять не только концентрацию, но и подвижность носителей заряда в квантовой яме, то есть степень эффективного беспорядка.

1. Z. D. Kvon *et al.*, Phys. Usp. **63**, 629 (2020).
2. G. M. Min'kov *et al.*, Jetp Lett. **101**, 469 (2015).

Влияние добавок MnTe на термоэлектрические свойства SiGe p-типа

М. Голикова[1]*, А. Иванова[1], А. Новицкий[1,2], В.В. Ховайло[1]
[1]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
[2]Национальный институт материаловедения, Япония, Цукуба
*e–mail: m2105458@edu.misis.ru

В основе технологии прямого преобразования тепловой энергии в электрическую лежит эффект Зеебека. Эффективность данного преобразования характеризуется безразмерной величиной, называемой термоэлектрической добротностью (zT) [1]:

$$zT = \frac{S^2\sigma}{k}T, \tag{1}$$

где S — коэффициент Зеебека, σ — удельная электропроводность, k — теплопроводность, T — температура.

Несмотря на заметные успехи в синтезе новых термоэлектрических материалов, в настоящее время одними из наиболее хорошо исследованных и используемых на практике высокотемпературных термоэлектрических материалов являются твердые растворы на основе Si-Ge [2]. Несмотря на достоинства данного соединения, для дальнейшего практического применения материалов на основе SiGe необходимо улучшение его zT. В данной работе, для повышения zT, мы используем метод получения композитов на основе матрицы SiGe и мелкодисперсного порошка MnTe в качестве наполнителя.

MnTe может служить источником дополнительных носителей заряда (дырок), является высокотемпературным полупроводником p-типа, а также может находиться в виде включений на границе зерен способствуя рассеянию фононов, что должно снижать теплопроводность.

В данной работе были получены объемные образцы методом искрового плазменного спекания смешанных порошков, состоящих из легированного бором SiGe и MnTe в следующих номинальных и весовых составах: $(Si_{0.75}Ge_{0.25})_{0.98}B_{0.02} + x$MnTe ($x = 0, 2, 4, 6$ вес.%). Добавление порошка MnTe в матрицу SiGe увеличило электропроводность на 30%, по сравнению с чистым SiGe, и уменьшило решеточную теплопроводность на 10%, из-за рассеяния фононов на точечных дефектах и границах зерен. Однако предположительно из-за увеличения концентрации носителей также уменьшился коэффициент Зеебека композитов. Таким образом, были достигнуты значения термоэлектрической добротности, которые достигают $0.94-0.99$ при 1000 К.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-12-00405).

1. А. Ф. Иоффе, Полупроводниковые термоэлементы. — М.: АН СССР (1960).
2. R. Basu, A. Singh, Materials Today Physics **21**, 100468, (2021).

Синтез и структура серебряных форм полисурьмяной кислоты с различной степенью замещения

Ф.А. Ярошенко, А.Е. Силова, А.И. Голованова, Ю.А. Лупицкая*

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e–mail: lupitskaya@gmail.com

В настоящее время приоритетным направлением в развитии современного материаловедения является разработка новых перспективных материалов, обладающих специальными электрическими свойствами, и в большей степени интерес представляют твердые электролиты с высокой протонной проводимостью [1].

К твердым протонным проводникам относится широкий класс соединений от низкотемпературных кристаллогидратов неорганических соединений — гетерополикислот и их солей до высокотемпературных оксидов [2]. Полисурьмяная кислота (ПСК) и соединения на ее основе являются одними из перспективных материалов, обладающими ионпроводящими и ионообменными свойствами, которые могут найти практическое применение в качестве низко- и среднепротонпроводящих композиционных мембран [3].

Согласно [3], ПСК и ее производные характеризуются структурой типа дефектного пирохлора (пространственная группа $Fd\bar{3}m$), каркас которой представляет собой трехмерную сетку, образованную сурьмяно-кислородными полиэдрами (октаэдрами) $[Sb(V)O_{6/2}]$. При этом каркас структуры формируют ионы Sb^{5+} и O^{2-} статистически располагающиеся в $16c$- и $48f$-позициях соответственно, а противоионы H_3O^+ — в $16d$-позициях [3].

В [3] установлено, что ионообменные свойства ПСК определяются диффузионной подвижностью протонных группировок. Так, при замещении протонных группировок на ионы металлов Na^+, K^+, Ag^+, Cs^+, Sr^{2+}, Cd^{2+}, Ba^{2+}, Pb^{2+} происходит изменение структурных параметров кристаллической решетки ПСК, приводящее к изменению величины протонной проводимости. Показано, что ионообменные свойства зависят не только от природы катиона, замещающего противоионы в структуре ПСК, но и способа ее получения.

В связи с этим в настоящей работе представлены результаты методики получения серебряных форм ПСК состава $Ag_{2\gamma}H_{2-2\gamma}Sb_2O_6{\cdot}2H_2O$ в широком концентрационном интервале γ от 0.2 до 1.0 и изучены их структурные особенности. В частности, методом рентгендифракционного анализа (м. Ритвельда) проведено уточнение параметров кристаллической решетки исследуемых соединений и установлено, что при увеличении степени замещения параметр элементарной ячейки монотонно уменьшается от 10.350 до 10.280 Å. На основании экспериментально полученных данных для синтезированных ионзамещенных серебряных форм в рамках пр. гр. $Fd\bar{3}m$ предложена модель заселения ионами кристаллографических позиций: ионы Ag^+ статистически располагаются в структуре ПСК в $16d$- и $8b$- позициях соответственно, вытесняя протонсодержащие группировки H_3O^+ из структуры.

1. А.Б. Ярославцев, Журн. неорган. химии **35**, 7 (1990).

2. О.А. Меженина, Вестник ЮУрГУ **13**, 8 (2012).

3. Ю.А. Лупицкая, Челябинский физико-математический журнал **6**, 4 (2021).

Синтез и электрические свойства интеркалированных твёрдых растворов $Cr_xZr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$

А.И. Меренцов[1]*, С.В. Пряничников[2], Е.Г. Шкварина[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: alexander.merentsov@urfu.ru

Соединения $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ принадлежат к группе слоистых дихалькогенидов переходных металлов, демонстрирующих наличие когерентно связанных структурных фрагментов в пределах одного монокристалла. Такая морфология возникает из-за перераспределения компонентов системы в связи с наличием градиента свободной энергии между объёмом и границей раздела структурных фрагментов [1]. Особый интерес представляет влияние подобного рода морфологии на свойства материалов. Так, известно, что $TiSe_2$ демонстрирует переход в состояние с волной зарядовой плотности (ВЗП) при температуре 200 K [2], однако допирование $TiSe_2$ различного рода примесями приводило к быстрому подавлению этого перехода. Ранее нами обнаружено, что при замещении титана цирконием в решётке $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ при концентрации $x = 0.25$ происходит возобновление перехода. Эффект, однако, значительно зависит от концентрации свободных носителей заряда в материале, которая определяется условиями синтеза. В настоящей работе синтезированы интеркалатные соединения $Cr_xZr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$ на основе соединения с возобновлённым (по сравнению с $TiSe_2$) переходом в состояние с ВЗП. Представляется, что хром, во-первых, должен выступать в качестве донора, и, во-вторых, существенно изменять магнитные свойства материала.

Материалы синтезированы в три стадии методом твердофазных реакций. На первой стадии из элементов синтезированы матрицы $TiSe_2$ и $ZrSe_2$ с двумя гомогенизационными отжигами (температура синтеза и отжигов 800°C, время синтеза и каждого из отжигов 5 суток). На второй стадии порошки $TiSe_2$ и $ZrSe_2$ смешивались в нужных пропорциях для получения $Zr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$, прессовались в таблетку и отжигались в течение 2 суток при температуре 800°C с последующей гомогенизаций при той же температуре. На третьей стадии получившийся порошок $Zr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$ и элементарный хром (порошок, чистота 99.95) смешивались в нужных пропорциях для получения соединений $Cr_xZr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$ ($x = 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 1$), прессовались в таблетки и дважды отжигались при температуре 800°C в течение 3 суток. Получившиеся образцы оказались неоднофазны. Они содержат смесь основной фазы $Cr_xZr_yTi_{1-y}Se_2$, оксида титан TiO_2 и оксида циркония ZrO_2. При содержании хрома до $x = 0.25$ основная фаза изоморфна материнскому твёрдому раствору $Zr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$ (пространственная группа $P\bar{3}m1$, структурный тип CdI_2). Увеличение содержания хрома приводит к уменьшению объёмной доли примесной фазы; начиная с $x = 0.25$ хром упорядочивается в атомные цепочки, а структура основной фазы становится $I2/m$. При концентрации хрома $x = 1.85\%$ атомов хрома занимают окта-позиции в межслоевом пространстве, а 15% уходят в тетра-позиции. На температурных зависимостях электросопротивления наблюдается полное подавление перехода в состояние с ВЗП при концентрации хрома $x = 0.25$ и полная металлизация соединения. Величина удельного сопротивления уменьшается с увеличение концентрации хрома, что говорит, как и предполагалось, о его донорном характере.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-60031.

1. A.N.Titov, A.S.Shkvarin, A.I.Merentsov, O.V.Bushkova, E.A.Suslov, A.A.Titov, J.Avila, M.C.Asensio, N.V.Kazantseva, M.S.Postnikov, Chemistry of materials **33**, 8915 (2021).
2. C. Monney, E.F. Schwier, M.G. Garnier, N. Mariotti, C. Didiot, H. Cercellier, J. Marcus, H. Berger, A.N. Titov, H. Beck, P. Aebi, New J. Phys. **12**, 125019 (2010).

Квантовые осцилляции холловской проводимости в квазидвумерных металлах

Т.И. Могилюк[1]*, П.Д. Григорьев[2,3]

[1]Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
[2]Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия
[3]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
*e–mail: 5taras@mail.ru

Мы находим выражения для холловской внутрислоевой проводимости в квазидвумерных металлах, описывающие её квантовые и так называемые «медленные» [1-3] осцилляции в магнитном поле. Показывается наличие зануления амплитуды медленных осцилляций холловской проводимости при определённой величине магнитного поля. С учётом ранее выведенных выражений для диагональной компоненты тензора проводимости [4], получены выражения для тензора магнетосопротивления. Данная работа наконец закроет вопрос вычисления трёхмерного тензора магнетосопротивления вкупе с работами [3, 4].

В расчёте используется самосогласованное борновское приближение. Примеси считаются точечными и случайно разбросанными по объёму квазидвумерного металла. Для вычисления холловской проводимости применяется формула Смрчка-Стреды [5].

Вопрос вычисления магнитных квантовых и медленных осцилляций магнетосопротивления имеет большое практическое значение для анализа многочисленных экспериментов. Медленные осцилляции предоставляют дополнительный полезный источник данных для анализа, поскольку они более устойчивы к влиянию к влиянию температуры и макроскопическим неоднородностям, нежели шубниковские осцилляции. Измеряя медленные осцилляции можно оценить туннельный интеграл, тип беспорядка в системе.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ №21-52-12027.

1. M. V. Kartsovnik *et al.*, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 47, 302 (1988) [JETP Lett. 47, 363 (1988)].
2. M. V. Kartsovnik *et al.*, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 48, 498 (1988) [JETP Lett. 48, 541 (1988)].
3. P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B, 67, 144401 (2003).
4. T. I. Mogilyuk and P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B **98**, 045118 (2018).
5. P. Streda, J. Phys. C: Solid State Phys. **15**, L717 (1982).

Спин-орбитальное расщепление в квантовых ямах CdHgTe с нормальной и инвертированной зонной структурой

А.О. Пакулов[1]*, С.В. Гудина[2], К.В. Туруткин[2], В.Н. Неверов[2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: pakulov16@gmail.com

Снятие спинового вырождения в отсутствии магнитного поля является темой постоянного интереса при исследовании гетероструктур на основе узкощелевых и бесщелевых полупроводников. Для возможных применений в спинтронике спин-орбитальное расщепление было исследовано в квантовых ямах (КЯ) II-VI HgTe, в которых значения энергии расщепления достигают рекордных 30 мэВ [1-4], что сравнимо с тепловой энергией при комнатной температуре $k_B T = 26$ мэВ. В дополнение к малой энергетической щели в квантовых ямах HgTe, еще одним важным фактором, способствующим большой величине спин-орбитальной связи, является инвертированный тип зонной структуры КЯ HgTe с шириной слоя больше 6 нм, когда край зоны проводимости формируется p-состояниями зоны Γ_8, а не s-состояниями зоны Γ_6, как в традиционных гетеросистемах. Переход от инвертированного типа зонной структуры к нормальному происходит также при изменении содержания Cd в твердом растворе $Cd_xHg_{1-x}Te$ при $x > 0.16$, что дает дополнительный способ управления параметрами энергетического спектра.

Для определения параметров спин-орбитального расщепления в квантовых ямах наиболее интенсивно применяется исследование области квантующих магнитных полей для обнаружения и анализа биений осцилляций Шубникова-де Гааза (ШдГ).

Исследованы образцы с квантовыми ямами $Hg_{1-x}Cd_xTe$ ($x = 0.11; 0.00$) шириной 10 и 7 нм, симметрично легированные в барьере с концентрацией электронов $n \approx (3.4 \text{ и } 4.1)\cdot 10^{12}$см$^{-2}$, выращенные так, что при близкой ширине ямы получились бы системы с разным типом зонной структуры. И действительно, расчеты энергии уровней размерного квантования в зависимости от ширины ямы в рамках 8-ми-зонной модели Кейна для исследованных структур показывают, что при выбранной ширине первая структура имеет нормальный тип зонной структуры, а вторая — обратный порядок зон.

Благодаря высокому качеству образцов и высокой концентрации электронов в наших структурах наблюдается удивительно богатая картина осцилляций ШдГ. В образце с нормальным энергетическим спектром наблюдались узлы биений осцилляций ШдГ, что позволило определить величину спин-орбитального расщепления на уровне Ферми в нулевом магнитном поле, $\Delta \approx 10$ мэВ. В образце же с инвертированным порядком зон нам не удалось наблюдать узлы биений осцилляций ШдГ и оценить Δ, хотя в этом образце обнаружена магнитополевая зависимость продольного сопротивления, характерная для эффекта слабой антилокализации, который свидетельствует о наличии спинового рассеяния в системе, т.е. о конечном спиновом расщеплении в нулевом поле.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон», при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. Y. S. Gui *et al.*, Phys. Rev. B **70**, 115328 (2004).
2. К. Э. Спирин и *др.*, Письма в ЖЭТФ **92**, 65 (2010).
3. K. H. Gao *et al.*, EPL **124**, 27006 (2018).
4. S.V. Gudina *et al.*, Nanomaterials **12**, 1238 (2022).

Определение эффективного g-фактора в метаморфных гетероструктурах InGaAs/InAlAs с высоким содержанием InAs в наклонных магнитных полях

Н.С. Сандаков*, С.В. Гудина, В.Н. Неверов, А.С. Боголюбский, К.В. Туруткин, М.В. Якунин

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

*e–mail: sandakov-n@mail.ru

Полупроводниковые гетероструктуры InGaAs/InAlAs вызывают большой интерес исследователей из-за выдающихся свойств носителей заряда, а именно, большой величины эффективного g^*-фактора и малой эффективной массы и, как следствие, высокой подвижности. Данные структуры могут найти перспективное применение в спинтронике, где для реализации новых функциональных возможностей используется спиновая степень свободы носителей заряд [1].

В рамках данной работы были проведены гальваномагнитные исследования гетероструктур InGaAs/InAlAs с квантовой ямой $In_{0.9}Ga_{0.1}As$ шириной 14 нм с высоким содержанием InAs, холловской концентрацией $n = 6.8 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$, подвижностью $2 \cdot 10^5$·см^2/(В·с) в магнитных полях до 13 Тл при фиксированной температуре 1.8 K. Проанализирована эволюция амплитуды, фазы и положения осцилляций Шубникова де-Гааза и квантового эффекта Холла при различных углах наклона магнитного поля по отношению к нормали образца, что позволило определить эффективный g^*-фактор носителей заряда.

Предложенный в работе [2] метод совпадений, основа которого строится на предположении, что изменение угла наклона магнитного поля позволит изменять соотношение между энергиями орбитального квантования и зеемановского расщепления, дает возможность определить значение эффективного g^*-фактора на уровне Ферми. Согласно вышеописанному методу для исследуемого образца нами были получены значения эффективного g^*-фактора для различных нечетных факторов заполнения: $|g^*| = 14.8, 10, 9.4$ и 9 для $\nu = 3, 5, 7$ и 9 соответственно. Наблюдается уменьшение значений g^*-фактора с уменьшением магнитного поля.

Теоретические расчеты показывают [3], что зависимость g^*-фактора от магнитного поля имеет осциллирующий характер, если учесть экранирующее электрон-электронное взаимодействие, пики будут наблюдаться при нечетных факторах заполнения, причем эффект экранировки делает немонотонной зависимость значений g^*-фактора от магнитного поля. Отмечено [4], что необходимо с осторожностью относиться к результатам, полученным с помощью метода совпадений для структур с непараболичным законом дисперсии, поскольку обменное усиление g^*-фактора будет определяться как параллельной, так и перпендикулярной составляющей магнитного поля, поэтому при различных углах наклона значения g^*-фактора будут отличаться.

Полученные значения эффективного g^*-фактора много больше, чем истинный фактор Ланде $|g_0|$ для подобных структур [5], что указывает на необходимость учета обменного усиления вследствие электрон-электронного взаимодействия.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон», при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. C.L. Kane and M.P.A. Fisher, Phys. Rev. B **46**, 15233 (1992).

2. В.В. Афонин и В.Ю. Петров, Письма в ЖЭТФ **109**, 797 (2019).

3. В.В. Афонин, принята в ЖЭТФ.

4. Murray Gell-Mann and F.E. Low, Phys. Rev. **95**, 1300 (1954).

5. В.В. Афонин и В.Ю. Петров, Письма в ЖЭТФ **97**, 587 (2013).

Особенности электрических, магнитных и гальваномагнитных свойств сплавов Mn_3Z

А.А. Семянникова[1]*, В.Ю. Ирхин[1], П.С. Коренистов[1], П.Б. Терентьев[1], Е.Б. Марченкова[1], В.В. Марченков[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: semiannikova@imp.uran.ru

Интерметаллические соединения системы Mn_3Z (Z = Al, Ga, Ge, Si), где Z — s- и p-элементы таблицы Менделеева, представляют большой интерес, так как могут быть антиферромагнитными [1, 2, 3], находиться в состоянии компенсированного ферримагнетика [4, 5], топологического полуметалла и фрустрированного магнетика [6]. Данные материалы обладают очень чувствительными к внешним воздействиям магнитными и электронными характеристиками. С помощью магнитного и электрического полей, давления и температуры можно управлять транспортными и магнитными свойствами таких соединений, что позволяет их рассматривать как перспективные для практического применения в устройствах спинтроники.

Цель данной работы заключается в изучении структуры, магнитных, электрических и гальваномагнитных свойств системы интерметаллических соединений Mn_3Z (Z = Al, Ga, Ge, Si), поскольку это позволит описать эволюцию электронной структуры и магнитного состояния этих соединений, понять особенности проявления состояния антиферромагнетика и компенсированного ферримагнетика, топологического полуметалла и фрустрированного магнетика, их сходство и различия.

Поликристаллические сплавы Mn_3Z были приготовлены в индукционной печи. Полученные слитки отжигались в течение 72 часов при 650°C в атмосфере аргона с последующим охлаждением до комнатной температуры со скоростью 100 К/ч. Элементный и рентгеноструктурный анализ был проведен в Центре коллективного пользования ИФМ УрО РАН. Электросопротивление измерялось стандартным четырех-контактным методом на постоянном токе с изменением направления тока через образец при температурах от 4.2 до 300 К. Полевые зависимости намагниченности были измерены на СКВИД-магнитометре `Quantum Design MPMS-XL-5`. Гальваномагнитные свойства были измерены на установке «Oxford Instruments» в магнитных полях до 100 кЭ.

В результате проведенных исследований было обнаружено, что при варьировании Z-компоненты величина остаточного сопротивления ρ_0 и вид температурных зависимостей электросопротивления, а также намагниченность насыщения M_s и эффект Холла значительно изменяются.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №22-22-00935).

1. Y. Zhang *et al.*, Phys. Rev. B **95**, 075128 (2017).
2. K. Manna *et al.*, Nat. Rev. Mater. **3**, 244 (2018).
3. V.V. Marchenkov *et al.*, J. Supercond. Nov. Magn. **35**, 2153 (2022).
4. M.E. Jamer *et al.*, Phys. Rev. Appl. **7**, 064036 (2017).
5. V.V. Marchenkov *et al.*, JETP **128**, 919 (2019).
6. H. Yang *et al.*, New J. Phys. **19**, 015008 (2017).

Возникновение разности потенциалов вследствие неэквивалентности контактов в режиме квантового эффекта Холла

К.В. Туруткин*, С.В. Гудина, В.Н. Неверов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: 12546@bk.ru

Целочисленный квантовый эффект Холла (КЭХ), состоящий в том, что на магнитополевой зависимости поперечного (холловского) сопротивления вырожденного двумерного электронного газа (ДЭГ) при достаточно низких температурах в сильных магнитных полях наблюдаются участки с неизменным сопротивлением или плато (рис. 1e), может быть интерпретирован на основе модели краевых состояний. Экспериментальный образец с ДЭГ имеет границу, задаваемую литографическим краем или краем области под затвором. Возле края формируется обедняющее электрическое поле, приводящее к зависимости нуля отсчёта уровней Ландау от координаты, поэтому уровни Ландау «изгибаются» вверх вблизи края. Как известно, в скрещенных магнитном и электрическом полях заряженная частица дрейфует вдоль линий постоянной энергии - эквипотенциалей. Электроны заполняют состояния согласно статистике Ферми–Дирака до некоторого уровня Ферми, и при факторе заполнения, близком к целочисленному значению, вдали от краёв формируются локализованные состояния, не участвующие в проводимости, а вблизи краёв — краевые токовые состояния. Причем ток на противоположных берегах ДЭГ имеет противоположное направление, которое задаётся знаком квантующего магнитного поля.

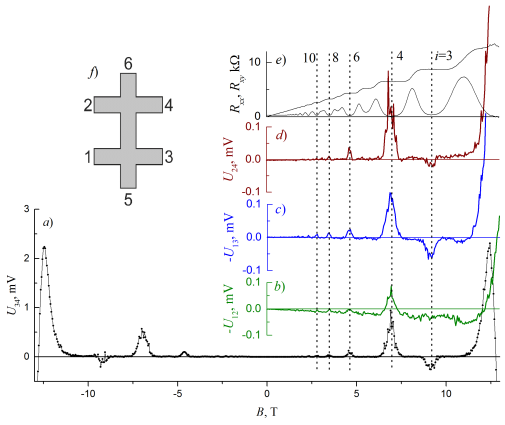


Рис. 1. a)-d) Зависимость напряжения на потенциальных контактах холловского мостика от магнитного поля; e) Зависимость продольного (R_{xx}) и холловского (R_{xy}) сопротивлений от магнитного поля; f) Схематичный вид холловского мостика. 1–4 — потенциальные контакты, 5–6 — токовые контакты.

В магнитных полях, отвечающих середине плато КЭХ, в отсутствие тока через образец экспериментально наблюдались пики напряжения на потенциальных контактах (рис. 1a-d) в образце с геометрией холловского мостика (рис. 1f). Знак и величина пиков напряжения имеют случайный характер от образца к образцу [1], эффект четный по магнитному полю (рис. 1a). Если считать, что все потенциальные контакты эквивалентны, то нет никаких причин, которые могли бы привести к появлению указанных пиков напряжения. Мы считаем, что наличие пиков в области плато КЭХ связано с неэквивалентностью потенциальных контактов, а именно, с влиянием магнитного поля, создаваемого краевым током вблизи контакта, на краевой ток в контакте (аналог силы Ампера). Когда магнитное поле отвечает переходной области между плато КЭХ, появляются токи в объеме образца, и этот эффект пропадает.

Измерения напряжения в зависимости от силы тока в области плато КЭХ показали, что величина эффекта определяется полным краевым током (краевой ток, определяемый внешним магнитным полем, + ток через образец), протекающим вблизи контакта.

Работа выполнена по государственному заданию «Электрон», при поддержке Минобрнауки РФ 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. В.А. Кульбачинский, неопубликованые данные; Д.В. Похабов, неопубликованые данные.

Сенсорные характеристики наноструктурированной пленки CuO к этанолу

Л.Ю. Федоров[1,2*], А.В. Ушаков[1,2], И.В. Карпов[1,2]

[1]Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия
[2]ФИЦ Красноярский научный центр СО РАН, Красноярск, Россия
*e–mail: 1401-87@mail.ru

В основе работы хеморезистивных полупроводниковых газовых сенсоров лежит модуляция сопротивления чувствительного слоя. Механизм обнаружения газа включает адсорбцию кислорода поверхностью полупроводника и последующее взаимодействие между молекулами аналита с предварительно адсорбированным кислородом. Обмен электронами, происходящий при взаимодействии газов, приводит к изменению сопротивления сенсора. В числе прочих оксидов металлов, было показано успешное использование оксида меди различных морфологических форм в кондуктометрических датчиках [1, 2].

Данная работа является развитием исследований хеморезистивной чувствительности наноструктурированных пленок CuO к различным восстановительным газам. Ранее, нами сообщалось об исследовании сенсорных характеристик таких пленок к газообразному водороду H_2 [3]. Здесь мы рассматриваем чувствительность CuO к парам этанола — часто встречающегося аналита в исследовательских работах. Пленка оксида меди является высокопористой, состоящей из вертикально ориентированных нитевидных нанокристаллов. Это обеспечивает хороший доступ газов к большой площади поверхности, что вызывает значительные изменения сопротивления.

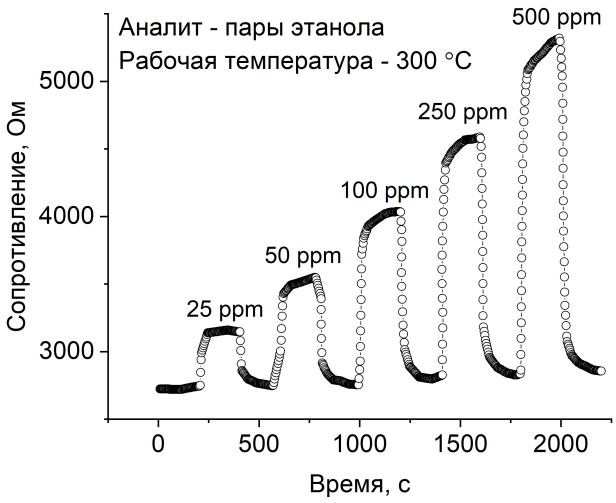


Рис. 1. Динамическая зависимость сопротивления датчика с наноструктурированным CuO от концентрации этанола.

На рис. 1 представлена динамическая зависимость сопротивления датчика от различных концентраций паров этанола. Видно, что сопротивление увеличивалось при воздействии газообразного этанола из-за его восстановительного поведения, аналогично водороду.

Датчик обнаруживает низкие концентрации этанола до 25 частей на миллион со значительным откликом (1.15). При концентрациях этанола 50, 100, 250 и 500 ppm отклики сенсора составляли 1.27, 1.45, 1.64 и 1.89 соответственно. Результат указывает на то, что датчик с CuO более эффективен для обнаружения этанола, в сравнении с водородом при измеренной температуре. Это обусловлено механизмом взаимодействия между молекулами этанола и предварительно адсорбированным кислородом на пленке CuO, который можно выразить следующим образом: $C_2H_5OH(ads) + 6O^-(O^{2-})(ads) \rightarrow 2CO_2 + 3H_2O + 6(12)e^-$. Видно, что взаимодействие между молекулами этанола и предварительно адсорбированным кислородом высвобождает больше электронов, чем у водорода. Это приводит к более высокому отклику датчика.

Работа выполнена в рамках госзадания ES-2021-0026.

1. S. Steinhauer, Chemosensors **9**, 51 (2021).
2. Г.Н. Герасимов, В.Ф. Громов, М.И. Иким *и др.*, Химическая физика **40**, 65 (2021).
3. Л.Ю. Федоров А.В. Ушаков, И.В. Карпов, Письма в ЖТФ **48**, 18 (2022).

Электрические и гальваномагнитные свойства полуметалла Вейля WTe_2

Б.М. Фоминых[1,2*], А.Н. Перевалова[1], С.В. Наумов[1], С.М. Подгорных[1], В.В. Чистяков[1], Е.Б. Марченкова[1], В.В. Марченков[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: fominykh@imp.uran.ru

Полуметаллы Вейля представляют собой новый класс соединений, которые благодаря своим уникальным физическим свойствам могут найти широкое применение во многих областях науки и техники. Известно, что к таким материалам относят WTe_2.

Особенности электронной зонной структуры полуметаллов Вейля находят отражение в электронных свойствах и приводят к ряду необычных эффектов. Одним из таких эффектов, обнаруженных в монокристалле WTe_2, является квадратичная температурная зависимость электросопротивления в широком диапазоне температур от 2 до $\sim$ 70 K [1, 2]. Ожидается, что квадратичная температурная зависимость сопротивления будет наблюдаться и в приложенном внешнем магнитном поле. Целью данного исследования является определение вида температурных зависимостей сопротивления WTe_2 как в отсутствие, так и при наличии внешнего магнитного поля. Помимо этого, было проведено измерение эффекта Холла и применены однозонная и двухзонная модели для оценки концентрации и подвижности носителей тока.

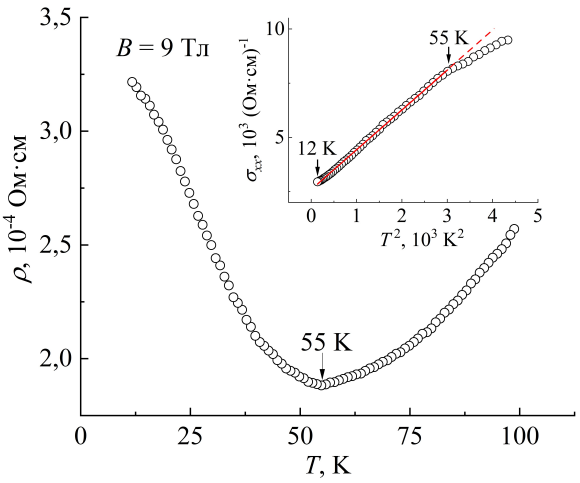


Рис. 1. Температурная зависимость сопротивления WTe_2 в магнитном поле 9 Тл. На вставке показана магнитопроводимость $\sigma_{xx} = f(T^2)$ в магнитном поле 9 Тл при температурах от 12 до 70 K [3].

В результате было установлено, что как проводимость, измеренная в ненулевом магнитном поле (см. вставку на рис. 1), так и электросопротивление в нулевом магнитном поле зависят от температуры по квадратичному закону в температурном интервале от 12 до $\sim$ 55 K и $\sim$ 70 K, соответственно. Обнаруженный минимум на зависимости сопротивления в магнитном поле $B = 9$ Тл можно объяснить переходом от сильных ($\omega_c\tau \gg 1$, где ω_c — циклотронная частота, τ — время свободного пробега) к слабым ($\omega_c\tau \ll 1$) магнитным полям (рис. 1). Кроме того, были сделаны оценки концентрации и подвижностей носителей тока из анализа данных по эффекту Холла с применением однозонной и двухзонной моделей.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Спин», № 122021000036-3) при частичной поддержке стипендии Президента РФ молодым ученым и аспирантам (Перевалова А.Н., СП-2705.2022.1).

1. Y.Y. Lv, L. Cao, X. Li *et al.*, Sci Rep. **7**, 44587 (2017).
2. V.V. Marchenkov, A.N. Perevalova (Domozhirova), S.V. Naumov, S.M. Podgornykh, E.B. Marchenkova, V.V. Chistyakov, J.C.A. Huang, J. Magn. Magn. Mater. **549**, 168985 (2022).
3. А. Н. Перевалова, С. В. Наумов, С. М. Подгорных, В. В. Чистяков, Е. Б. Марченкова, Б. М. Фоминых, В. В. Марченков, Физика металлов и металловедение **123** (2022), принята в печать.

Термоэлектрические свойства композита на основе скуттерудита n-типа

Е.В. Чернышова*, А.П. Новицкий, И.А. Сергиенко, А.И. Воронин, В.В. Ховайло

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

*e–mail: m152292@edu.misis.ru

Известно, что коэффициент полезного действия современных термоэлектрических (ТЭ) устройств не превышает 15%. В связи с этим продолжаются поиски более эффективных материалов. С практической точки зрения важнейшим параметром, определяющим свойства термоэлектрического материала (ТЭМ), является его термоэлектрическая добротность

$$zT = S^2 \cdot \sigma \cdot T/(\kappa_{\text{lat}} + \kappa_e), \tag{1}$$

где S — коэффициент термоЭДС, σ — удельная электропроводность, κ_{lat} и κ_e — решеточный и электронный вклад в общую теплопроводность, T — абсолютная температура.

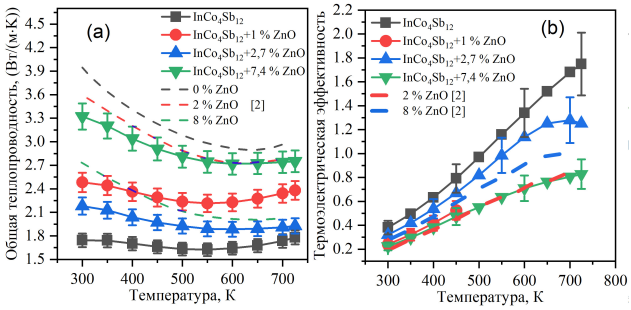


Рис. 1. Свойства полученных композитов. (a) — общая теплопроводность, (b) — термоэлектрическая эффективность.

Недавние исследования сосредоточены на разработке и производстве термоэлементов для ТЭ устройств из сегментированных материалов, что увеличивает диапазон температур с сохранением высокой zT. Однако различные коэффициенты термического расширения и химическая стабильность уложенных друг на друга материалов могут повлиять на их совместимость и затем снизить коэффициент полезного действия устройства. Одним из решений данной проблемы является получение композиционных термоэлектриков.

В качестве матрицы в данной работе используется ранее изученный [1] скуттерудит номинального состава $InCo_4Sb_{12}$, который был получен методом индукционной плавки. Смешивание в стехиометрических соотношениях с нанопорошком ZnO производилось в шаровой мельнице с целью получения композита $(InCo_4Sb_{12})_{1-x}ZnO_x$. Консолидация осуществлялась методом искрового плазменного спекания.

Было показано, что материалы имеют гомогенные области $In_yCo_4Sb_{12}$ с включениями In_2O_3, $(In,Zn)_3Co$, ZnO. Исследования температурных зависимостей транспортных свойств показали, что электрофизические параметры с повышением содержания ZnO изменяются в пределах ошибки. Теплопроводность полученных образцов, приведенная на рис. 1(a) повышается с добавлением ZnO, что противоречит ранее полученному результату [2]. Однако тенденция роста подтверждается расчетами в рамках различных моделей теплопроводности композиционных материалов [3]. zT полученных образцов, температурная зависимость которой показана на рис. 1(b), выше на 40% в сравнении со значениями в работе [2] при $T =$ 725 K. Расхождение зависимости общей теплопроводности с [2] может объясняться различием микроструктуры и фазового состава. Фазы In_2O_3 и ZnO с высокой теплопроводностью образуют агломераты, в то время как в [2] происходит рассеяние фононов на наночастицах второй фазы.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ №19-79-10282.

1. V. V. Khovaylo *et al.*, J. Mater. Chem. A. **5**, 3541 (2017).
2. C. Chubilleau *et al.*, J. Alloys Compd. **589**, 513 (2014).
3. R. C. Progelhof, J.L. Throne, R.R. Ruetsch, Polym. Eng. Sci. **16**, 615 (1976).

Квантовые интерференционные вклады в проводимость в структурах InGaAs/GaAs

М.А. Шишкин*, С.В. Гудина[2], В.Н. Неверов[2]
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: m-a-k-s225@bk.ru

Диффузионное движение электронов в двумерных системах со слабой степенью беспорядка приводит к квантовым интерференционным поправкам к проводимости от невзаимодействующих электронов (эффекты слабой локализации, $\Delta\sigma^{\mathrm{WL}}$) и за счет модифицированного беспорядком электрон-электронного взаимодействия, $\Delta\sigma^{\mathrm{ee}}$, которые относительно невелики, однако имеют нетривиальную зависимость от температуры T и магнитного поля B, что дает возможность выделить их на фоне друдевской проводимости. В пределе «грязного металла» (диффузионный режим $k_{\mathrm{B}}T\tau/h \ll 1$, где k_{B} — постоянная Больцмана, τ — время свободного пробега электрона, h — постоянная Планка) обе поправки логарифмически зависят от температуры, однако, в пределе чистого металла, при рассеянии на одиночной примеси (баллистический режим $k_{\mathrm{B}}T\tau/h > 1$) наблюдается линейная температурная зависимость.

Приложение магнитного поля также позволяет разделить вклады от этих эффектов, так как каждый из них обладает собственным характеристическим интервалом магнитных полей B. Для $\Delta\sigma^{\mathrm{WL}}$ характеристическим является поле $B_\varphi = h(4eD\tau_\varphi)^{-1}$ (D — коэффициент диффузии, e — заряд электрона), которое определяется временем сбоя фазы электронной волны τ_φ. Локализационный эффект практически полностью подавляется в так называемом транспортном поле $B_{\mathrm{tr}} = h(4eD\tau)^{-1}$, когда магнитная длина становится меньше длины свободного пробега. $\Delta\sigma^{\mathrm{ee}}$ характеризуется полем $B_z = k_{\mathrm{B}}T(g\mu_{\mathrm{B}})^{-1}$, когда происходит смена типа зависимости сопротивления с параболического на логарифмический.

Исследованы квантовые интерференционные вклады в проводимость структур с квантовыми ямами InGaAs/GaAs в широком интервале температур в диффузионном и баллистическом режимах.

Анализ зависимостей сопротивления от магнитного поля в интервале температур $0.05 \leqslant T \leqslant 4.2$ K (в диффузионном режиме) в рамках подхода, развитого в [1], позволил получить температурную зависимость времени фазовой когерентности $\tau_\varphi(T)$, которая, однако, оказалась далека от ожидаемой в пределе «грязного металла». Обсуждаются возможные причины такого расхождения, которые могут быть связаны с необходимостью корректного учета влияния эффекта Зеемана на электрон-электронное взаимодействие и линейного по температуре вклада от электрон-электронного взаимодействия в баллистическом режиме, который, согласно предсказаниям теории, не исчезает полностью при $k_{\mathrm{B}}T\tau/h < 1$, а конкурирует с логарифмическим членом и может давать вклад вплоть до самых низких температур.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон», при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. S. Hikami, A. Larkin, and Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. **63**, 707 (1980).
2. G. Zala, B.N. Narozhny, and I.L. Aleiner, Phys. Rev. B **64**, 214204 (2001).

Резонансные явления

Применение ядерно-резонансных методов для изучения структурных и магнитных свойств наночастиц

А.Ю. Гермов[1]*, Д.А. Прокопьев[1], А.С. Конев[1], Б.Ю. Голобородский[1], И.А. Курмачев[1], Е.В. Суворкова[2]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: germov@imp.uran.ru

Магнитные наночастицы со структурой ядро — углеродная оболочка имеют целый ряд привлекательных свойств. Благодаря таким свойствам как химическая стабильность в разных средах из-за углеродного покрытия, возможность функционализации, они привлекают значительный интерес и могут использоваться в качестве катализаторов [1], компонентов более сложных нанокомпозитов [2], в биотехнологических применениях [3].

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. Недавно было показано [4,5], что термообработка наночастиц на основе металлов группы железа и их сплавов позволяет увеличить намагниченность наночастиц и их размер. Убедительные экспериментальные свидетельства причин изменения намагниченности могут быть получены резонансными методами: необходим количественный фазовый анализ порошка и определение внутреннего устройства таких частиц [6].

В качестве образцов были взяты наночастицы Fe_xNi_{1-x} ($x = 0.25; 0.5; 0.75$) и Fe_xCo_{1-x} ($x = 0.4 - 0.8$) в углеродной оболочке (средний размер частиц $5 - 9$ нм) и без неё ($15 - 25$ нм), которые были исследованы с помощью ЯМР ^{61}Ni,^{59}Co и ^{57}Fe при температурах от $T = 4$ K до $T = 295$ K и ^{57}Fe мёссбауэровской спектроскопии при $T = 295$ K. Образцы приготовлены методом газофазного синтеза [4]. Исходный материал для частиц FeCo получен путем спекания порошков Fe и Co, а для FeNi — из двух проволок Fe и Ni. Материал подавался в камеру индукционной левитационной плавки, образуя расплавленную каплю, которая обдувалась потоком газовой смеси аргона и изобутана. Измерения намагниченности дают значение намагниченности насыщения почти вдвое меньше ожидаемого, что говорит о наличии дополнительных фаз или суперпарамагнитном поведении частиц. Для части образцов был проведён гомогенизирующий отжиг (540°C) в вакуумной камере ($P = 10^{-4}$ мм.рт.ст) в течении 4 часов. Электронная микроскопия высокого разрешения показывает наличие дополнительных металл-углеродных фаз, но их количество определить не удается.

В результате было показано, что с помощью локальных методов можно определить фазовый состав, ближайшее окружение, упорядоченные структуры. Доменные стенки не образуют отдельной дополнительной линии в спектре ЯМР, а монодоменное состояние — образует. Выяснено, что поверхность не играет решающей роли в магнитном состоянии магнитных наночастиц. Спектры ЯМР при низких температурах и мёссбауэровская спектроскопия выявляют суперпарамагнитные фазы.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 21-72-00007.

1. N.E. Gervits *et al.*, Beilstein J. Nanotechnol. **10**, 1964 (2019).
2. A. Motorzhina *et al.*, Processes **9**, 2264 (2021).
3. I. Simos *et al.*, Beilstein J. Nanotechnol., **12**, 343 (2021).
4. M.A. Uimin *et al.*, Phys. Met. Metallogr. **120**, 228 (2019).
5. A.Ye. Yermakov *et al.*, Materials Letters **254**, 202 (2019).
6. M. Manjunatha *et al.*, J. of Supercond. and Novel Magn. **32**, 3201 (2019).

Структурные и механические свойства твёрдых тел

Многомасштабное моделирование сдвиговой прочности Al-Cu сплава, насыщенного водородом

П.А. Безбородова*, В.С. Красников, А.Е. Майер

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
*e–mail: ibragimova-polin@mail.ru

В настоящей работе проведено многомасштабное исследование влияния водорода, накопленного на θ' фазах, на механические свойства Al-Cu сплава. Многомасштабный подход к описанию пластичности включает молекулярно-динамическое моделирование (МД), континуальную модель и дискретную дислокационную динамику (ДДД). В работе рассматриваются два диаметра включений θ': 5 и 10 нм. На МД уровне проведено исследование механизмов взаимодействия дислокации с упрочняющим включением и генерации дислокаций, в зависимости от содержащегося во включении водорода. Определены энергетически предпочтительные места расположения водорода вблизи упрочняющих включений θ'-фазы в Al-Cu сплаве. При накоплении водорода в объеме θ' происходит снижение сопротивляемости включения к сдвигу и реализуется смена механизма взаимодействия от формирования петли Орована к перерезанию включения. Проведено исследование влияния водорода на критические напряжения зарождения дислокаций вблизи θ' фазы. Показано, что накопление водорода ведет только к росту критического напряжения зарождения дислокаций, что объясняется тенденцией к росту давления в объеме включения и в окружающей матрице, значительно повышает барьер гомогенной нуклеации дислокаций в алюминии. МД данные обобщаются с помощью континуальной модели, описывающей основные процессы, наблюдаемые на атомарном уровне. Для перехода на мезоскопический масштабный уровень предложена двумерная схема ДДД, в которой рассматривается расчетная область, содержащая большое число дислокаций и упрочняющих включений. Результаты ДДД демонстрируют, что при фиксированной концентрации водорода, большую сдвиговую прочность и меньшую склонность к пластической локализации демонстрируют сплавы с мелкими упрочняющими включениями. Показано, что с ростом пластической деформации возможно разрушение упрочняющих включений с последующим снижением вклада включений в общее напряжение течения сплава.

Взаимодействие дислокаций с включением исследовано с использованием программного пакета LAMMPS [1]. Взаимодействие атомов описывается BOB потенциалом [2]. Анализ и визуализация полученных атомных распределений осуществляется с помощью пакета OVITO [3].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 18-71-10038

1. S.Plimpton, J. Comput. Phys. **117** (1995).

2. X. Zhou, D. Ward, M. Foster. New J. Chem. **42**, 5215 (2018).

3. A.Stukowski, Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2010).

Структурные особенности монокристаллов LaB_6 при температурах ниже 300 K

В.М. Гридчина*, О.Н. Хрыкина, Н.Б. Болотина

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
*e–mail: vasilisa.gridchina@gmail.com

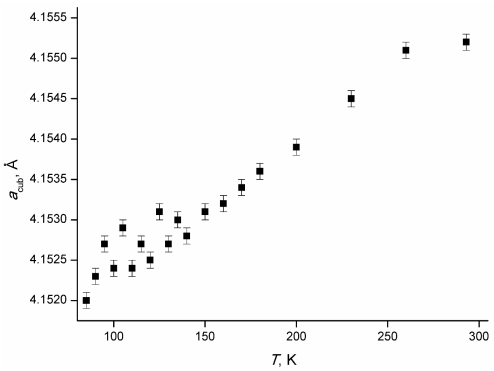


Рис. 1. Температурная зависимость периода решетки LaB_6

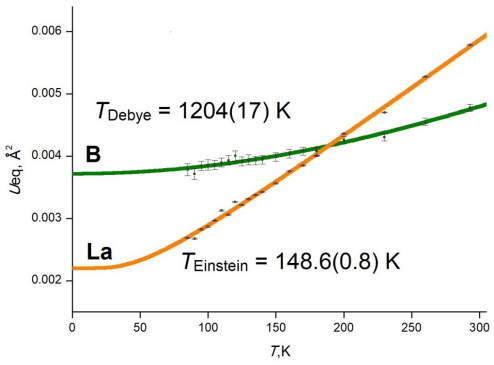


Рис. 2. Эквивалентные параметры атомных смещений u_{eq} лантана и бора. Точки — экспериментальные данные. Линии — результат моделирования.

При поиске новых применений важно учитывать стабильность структуры материалов при изменении температуры и других параметров окружающей среды. В настоящей работе рассмотрены монокристаллы LaB_6, обладающие химической и физической устойчивостью в сочетании с металлической проводимостью. Среди гексаборидов редкоземельных элементов RB_6 (R = La – Gd) LaB_6 — наиболее широко применяемый материал. Исследования некоторых поликристаллических образцов RB_6 различными дифракционными методами показали немонотонность зависимостей параметров элементарной ячейки и атомных смещений u_{eq} от температуры в области 100 – 180 K, например [1]. В недавних работах показаны искажения структурных характеристик монокристаллов других высших боридов в этой же температурной области [2].

Проведено 20 полных экспериментов на дифрактометре `Synergy DW` с изогнутым детектором счета фотонов `HyPix-Arc` 150°, в температурном диапазоне 85 – 293 K. Структура монокристалла LaB_6 уточнена в пр. гр. $Pm\bar{3}m$. Величины R-факторов уточнения структурной модели не превышали 0.82%. Зависимость периода решетки LaB_6 от температуры ниже 160 K становится немонотонной (рис. 1). Моделирование динамики атомов бора и лантана и расчеты характеристических температур Дебая и Эйнштейна, соответственно, проведены с помощью программы `DebyeFit` [3]. В качестве экспериментальных данных из структурной модели взяты параметры u_{eq}, а характеристические температуры Дебая и Эйнштейна, соответственно, были одними из уточняемых параметров, что позволило получить несмещенные оценки погрешностей в определении этих температур (рис. 2). Характеризация структурных изменений на основе динамики решетки приводит к более точным результатам, чем анализ температурных зависимостей параметров элементарной ячейки.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН при поддержке Минобрнауки.

1. V.A. Trounov, J. Phys.: Condens. Matter **5**, 2479 (1993).
2. O.N. Khrykina, SSS **107**, 106273 (2020).
3. A.P. Dudka, J. Appl. Cryst. **52**, 690 (2019).

Образование интерметаллидных фаз в кобальтовых жаропрочных сплавах

Д.И. Давыдов
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e–mail: davidov@imp.uran.ru

В жаропрочных сплавах на основе кобальта основными фазами являются твердый раствор на основе ГЦК кобальта (γ-фаза) и упрочняющая γ'-фаза на основе интерметаллида $Co_3(Mo,Nb)$ со структурой $L1_2$. При этом в сложной многокомпонентной системе Co-Al-Mo-Nb возможно появление других различных интерметаллидных фаз: фазы типа DO_19, μ-фаза типа Co_7W_6, фаза B2 типа CoAl, нежелательные охрупчивающие фазы Лавеса.

В работе проведено исследование сплавов системы Co-Al-Mo-Nb, изучено влияния ниобия и молибдена на структуру на морфологии интерметаллидных фаз. Исследование структуры проводилось на микроскопе `Jeol JSM-6490LV`. Модули Юнга измеряли с помощью прибора `MHTX CSM Instruments` по методу Оливера и Фарра при нагрузке 9 Н.

Во всех сплавах наблюдается кубоидная структура, образованная интерметаллидом $Co_3(Mo,Nb)$. Обнаружено образование фазы Лавеса на основе интерметаллида Co_2Nb как по границам, так и внутри зерен (рис. 1). Такая фаза имеет различную морфологию, выделяется в виде игольчатых включений (структурный тип C36) или в виде частиц практически правильной прямоугольной формы (структурный тип C14).

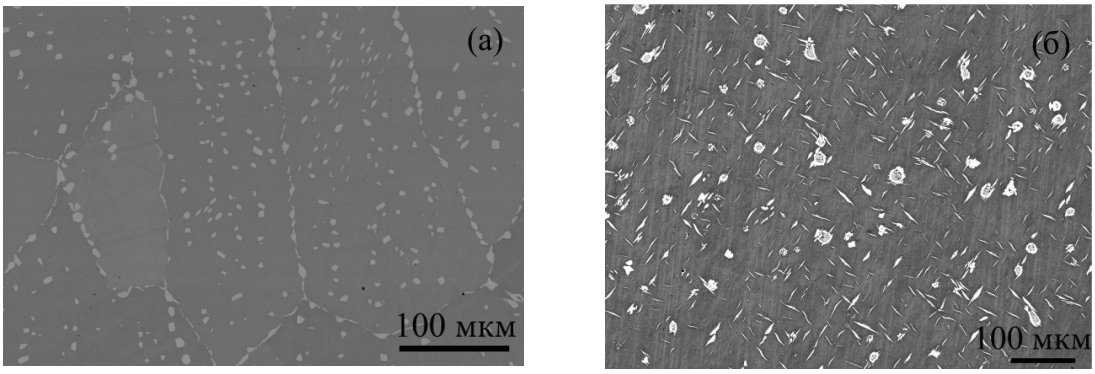


Рис. 1. Структура фазы Лавеса Co_2(Al,Nb Mo): а — выделения в виде частиц; б — игольчатые и округлые выделения.

Результаты измерения микротвердости и рассчитанных значений модулей Юнга в сплавах Co-9,5Al-2,9Mo-4Nb и Co-9,1Al-5,2Mo-4,7Nb можно условно разделить на две группы (таблица 1). Обнаружено, что микротвердость включений выше частиц фазы Лавеса, чем микротвердость твердого раствора теле зерна. В сплаве Co-8,9Al-6,5Mo-9,3Nb существенные различия в значениях микротвердости не наблюдаются.

Таблица 1. Модули Юнга и микротвердость исследованных сплавов.

Сплав	Co-9,5Al-2,9Mo-4Nb		Co-9,1Al-5,2Mo-4,7Nb		Co-8,9Al-6,5Mo-9,3Nb
	включения	зерно	включения	зерно	-
Микротвердость, МПа	765	393	539	391	840
Модули Юнга, ГПа	186	174	182	172	163

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (шифр «Аддитивность» № 121102900049-1).

Фазовая устойчивость $CuZrSe_2$ при нагреве $in-situ$

Е.Г. Шкварина[1], М.С. Постников[1,2], А.С. Шкварин[1,2], Е.Г. Дьячков[1,3]*, А.Н. Титов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия
[3]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: dyachkov.evgeniy.98@mail.ru

Дихалькогениды переходных металлов являются широким классом материалов с различными фундаментальными и практически важными свойствами. Кристаллическая структура таких материалов позволяет внедрять в межслоевое пространство атомы и молекулы. Это в свою очередь приводит к еще большему увеличению возможностей изменить физические свойства исходного материала. Диселенид циркония, интеркалированный медью, $CuZrSe_2$, является аналогом мультиферроика $CuCrSe_2$ с точки зрения кристаллической структуры. В $CuZrSe_2$ медь распределена по тетраэдрическим позициям так же, как и в $CuCrX_2$, с той разницей, что при комнатной температуре в $CuZrSe_2$ атомы меди распределены равномерно по обоим наборам тетраэдрических позиций, тогда как в $CuCrX_2$ отсутствует центр симметрии, и она склонна к сегнетоэлектрическому упорядочению.

В данной работе мы исследовали термическую устойчивость поликристаллической фазы в диапазоне $25-1000$°C. Поскольку эксперимент по нагреву лучше проводить с образцами, которые ранее не нагревались, синтез поликристаллической фазы $CuZrSe_2$ был выполнен при комнатной температуре, методика описана в работе [1]. Эксперимент по нагреву *in-situ* был выполнен на линии МСХ синхротрона Elettra (Италия). Время нагрева при каждой температуре составляло от 30 минут для низких (до 150°C) до 2 минут при высоких (более 850°C) температурах.

Полнопрофильное уточнение выполнено для 3 дифрактограмм — стартовая, 150°C и 450°C. Уточнение показало, что при комнатной температуре основная фаза это Cu_xZrSe_2 описывается пространственной группой $P\bar{3}m1$. Также наблюдаются небольшие пики не полностью растворившейся меди, что не удивительно при синтезе при комнатной температуре. При увеличении температуры до 150°C пик меди пропадает, вместо него появляется пик Cu_2Se_3. Это приводит к обеднению основной фазы медью и селеном. Дальнейший нагрев (до 450°C) приводит дальнейшему к обеднению основной фазы селеном, появлению новых фаз: $ZrSe_3$ и CuSe. Появление трихалькогенида вместо дихалькогенида мы уже наблюдали ранее в системе Cu_xZrTe_2 [2]. Судя по дифрактограммам, именно фаза $ZrSe_3$ становится превалирующей при высоких температурах. Однако опыт, полученный в результате работы с системой Cu_xZrTe_2 позволяет надеяться на решение этой проблемы путем закалок от высоких температур.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00361).

1. E.G. Shkvarina *et al.*, J. Chem. Phys. **147**, 044712 (2017).
2. A.S. Shkvarin *et al.*, J. Mol. Struct. **1205**, 127644 (2020).

Структурные свойства $Fe_xNi_yTiSe_2$

Е.Г. Дьячков[1,2]*, А.А. Титов[1], А.С. Шкварин[1,3], А.Н. Титов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[3]Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия
*e–mail: dyachkov.evgeniy.98@mail.ru

Слоистые дихалькогениды переходных металлов представляют собой широкий класс квазидвумерных материалов. Эти материалы демонстрируют ряд интересных фундаментальных и прикладных физических свойств, варьируемых в обширном диапазоне в зависимости от концентраций внедряемых в межслоевое пространство атомов. Матрица соединений из нашей работы может быть использована в качестве нанокомпозитной основы для создания постоянных магнитов.

В данной работе мы изучили кристаллическую структуру впервые синтезированного би-интеркалата $Fe_xNi_yTiSe_2$, $x = 0, 0.1, 0.25, 0.33, 0.5$, $y = 0, 0.1, 0.25, 0.33$. Методика синтеза матрицы описана в ссылке [1], а синтез моноинтеркалатов Fe_xTiSe и Ni_yTiSe — в ссылке [2]. Гипотеза о том, что синтез соинтеркалата будет аналогичен синтезу моноинтеркалатов тех же веществ, подтвердилась путем РФА. Структуру образцов порошка $TiSe_2$ и $Ni_yFe_xTiSe_2$ определяли с использованием рентгеновской порошковой дифракции (XRD) на дифрактометре `Shimadzu XRD 7000 Maxima` (излучение Cu $K\alpha 1$, графитовый монохроматор, $2\Theta = 5 - 90^\circ$). Уточнение параметров кристаллической структуры было выполнено с использованием `GSAS` (General Structure Analysis System). Диселенид титана, интеркалированный железом и никелем, имеет гексагональную структуру, причем Fe и Ni вне зависимости от концентрации полностью растворяются в октаэдрических позициях, однако при достижении концентрации $Fe_{0.25}Ni_{0.25}TiSe_2$, то есть порога перколяции для треугольной решетки, появляется моноклинное упорядочение.

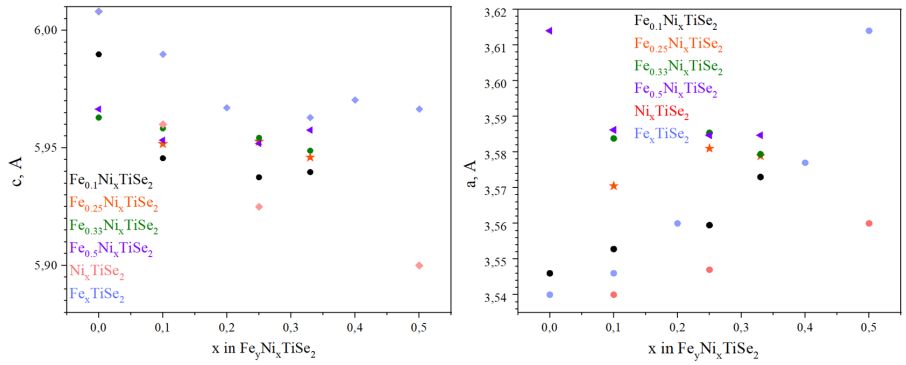


Рис. 1. Параметры решетки «a» (справа) и «c» (слева) для изученных концентраций «x» и «y» $Fe_xNi_yTiSe_2$ с демонстрацией изменений при увеличении концентрации никеля

Установлены зависимости структурных параметров (рис. 1) и позиций атомов в зависимости от концентрации интеркалированных металлов. Синтезированная система может служить прекурсором для создания нанокомпозитных сплавов, расширяя перспективы развития кластерной металлургии.

1. F.J. Di Salvo *et al.*, Phys. Rev. B **14**, 4321 (1976).
2. Е.Г. Шкварина, Термическая устойчивость интеркалированных диселенидов титана Fe_xTiSe_2 ($x = 0 - 0.5$) : дис. — Челяб. гос. ун-т (2014).

Применение сканирующей туннельной микроскопии для исследования зёренной структуры в ультрамелкозернистом ниобии

А.Ю. Истомина*, А.В. Столбовский, И.В. Блинов, Р.М. Фалахутдинов, Н.С. Чикунова, С.А. Мурзинова

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

Ультрамелкозернистые (УМЗ) материалы, полученные с использованием методов интенсивной пластической деформации (ИПД), представляет большой интерес в связи с их исключительными свойствами, такими как прочность, вязкость, по сравнению с их крупнозернистыми аналогами [1-3]. Полагается, что достижение исключительных свойств УМЗ связано с границами зерен (ГЗ), которые являются основным элементом структуры, влияющим на их характеристики. Наиболее часто используемыми методами исследования структуры УМЗ материалов являются просвечивающая электронная микроскопия, сканирующая электронная микроскопия с дифракцией обратного рассеяния электронов (EBSD). В работе [4] был предложен подход, основанный на сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) при исследовании УМЗ материалов. В то же время предложенные в данной работе способ получения рельефа травления имеет ограничения для металлов склонных к образованию устойчивого оксидного слоя, таких как ниобий или титан, что приводит к существенным трудностям получения рельефа травления УМЗ структуры. В результате травления химическим способом, образуются крупные зернограничные канавки, что приводит к искажению оцениваемых параметров зернограничной структуры.

Поэтому в данной работе было предложено для получения нанорельефа травления ГЗ использовать метод анодного окисления и последующего растворения оксидной пленки. В качестве исследуемого материала был использован ниобий после равноканального углового прессования (РКУП) на 16 проходов. Подробно результаты исследования структуры другими методами были описаны в работе [5].

В результате разработана методика подготовки образцов, а также были получены и проанализированы СТМ изображения зёренной структуры послойного анодного окисления УМЗ ниобия. Предложены методы как качественной, так и количественной оценки зеренной структуры по СТМ изображениям.

Показано, что анализ СТМ-изображений рельефа анодного окисления материалов с УМЗ структурой аналогичен металлографическому анализу крупнозернистых поликристаллов, а использование математической обработки позволяет получать изображение с сетью канавок ГЗ, необходимых для количественного анализа зёренной структуры. Произведено сравнение количественных характеристик зёренной структуры, полученных по СТМ изображениям с характеристиками, измеренными в работе [5] и установлено их практически полное сходство.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», № 122021000035-6).

1. R.Z. Valiev, R.K. Islamgaliev, I.V. Alexandrov, Progress in Materials Science **45**, 103 (2000).

2. T.G. Langdon, Acta Materialia **61**, 7035 (2013).

3. Y. Estrin, A. Vinogradov, Acta Materialia **61**, 782 (2013).

4. P.V. Kuznetsov *et al.*, Physics of Metals and Metallography **118**, 241 (2017).

5. V.V. Popov, E.N. Popova, A.V. Stolbovskiy, Materials Science and Engineering A. **539**, 22 (2012).

Исследование внутреннего трения в поликристаллах оксида галлия резонансным методом на частоте 100 кГц

Е.С. Моругин, В.А. Спиридонов, Д.Ю. Панов, Д.А. Калганов*

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

*e–mail: kalganov@itmo.ru

Полупроводниковые материалы на основе оксида галлия перспективны для использования в устройствах силовой электроники и солнечно-слепых фотодетекторах [1]. Среди открытых шести полиморфных форм, только моноклинная β-Ga_2O_3 стабильна до температуры плавления при атмосферном давлении и может быть относительно легко получена стандартными методами. Совершенствование технологий выращивания кристаллов оксида галлия для достижения низкой плотности дефектов, улучшения транспортных свойств и стабильности зонной структуры является ключевым фактором для его практического применения.

В работе исследовались поликристаллические сростки β-Ga_2O_3, полученные методом Чохральского при существенно различных условиях, задающих в процессе роста вертикальный градиент температуры, состав атмосферы, вид примеси [2]. Для определения внутреннего трения, характеризующего движение и взаимодействие дефектов, использовался резонансный метод с частотой колебаний 100 кГц. На рис. 1 показан внешний вид образцов, а также полученные амплитудные и температурные зависимости.

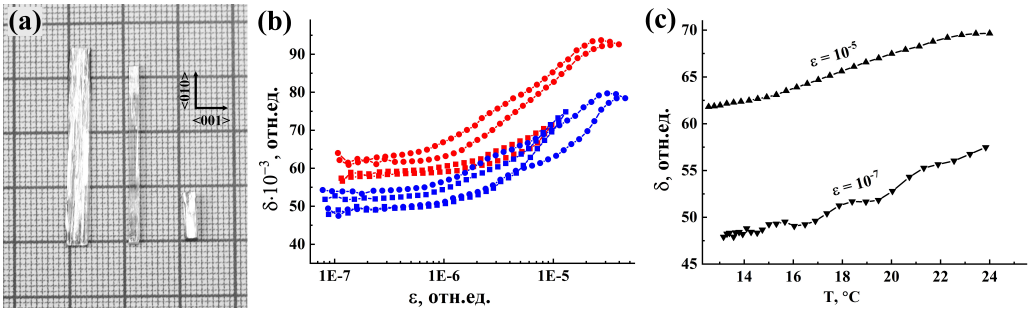


Рис. 1. Внешний вид исследуемых образцов — (a); амплитудные зависимости внутреннего трения — (b) при высокой — красные и низкой — температурах, изменение фонового и амплитудно-зависимого внутреннего трения с температурой — (c).

В исследованных поликристаллических образцах основное влияние на внутреннее трение при малых амплитудах оказывают двойниковые структуры в плоскости $(\bar{2}01)$ и взаимодействие дислокаций с вакансиями в системе $\{101\}$. При увеличении амплитуды деформации до 10^{-6} и выше наблюдается взаимодействие дислокаций в других системах скольжения с атомами примесей (W, Ir [2]), описываемое теорией закрепления (пиннинга).

По результатам измерений можно сделать вывод о значительном снижении подвижности дислокаций в образцах, полученных в кислородсодержащей атмосфере и уменьшении количества двойниковых структур. При этом эффекты, вызванные изменением вида примесных атомов, практически не оказывали влияние на внутреннее трение.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение №075-15-2021-1349).

1. J. Yang, Progress in Quantum Electronics **83** (2022).

2. D. I. Panov, Journal of Physics: Conference Series **1695**, 1 (2020).

Структура порошкового сплава TiNi после электронно-пучковой обработки

М.И. Кафтаранова*, С.Г. Аникеев, Н.В. Артюхова, В.Н. Ходоренко, О.Р. Мамазакиров, М.Н. Волочаев, С.А. Пахолкина, А.В. Шабалина

Томский государственный университет, Томск, Россия

*e–mail: kaftaranovami@gmail.com

Биомеханическая совместимость порошкового сплава на основе TiNi с тканями организма делает данный материал предпочтительным для создания имплантируемых конструкций [1]. Долговечное применение в медицине изделий из TiNi может быть ограничено из-за наличия частиц вторичных и примесных фаз. Согласно литературным данным [2] данные включения возникают в процессе создания материала и могут негативно повлиять на его свойства. Одним из способов удаления частиц с поверхности металлических материалов является обработка их поверхности низкоэнергетическим ($10-30$ кэВ) сильноточным ($10-25$ кА) электронным пучком (НСЭП).

В данной работе исследован порошковый сплав TiNi, полученный методом гидридно-кальциевого восстановления марки ПВ–Н55Т45, который подвергался электронно-пучковому воздействию. Размер частиц порошка $100-140$ мкм. Экспериментальные образцы состояли из однородного слоя порошкового сплава TiNi на монолитных пластинах. Чтобы исключить миграцию частиц порошка в процессе электронно-пучковой обработки, полученную заготовку с порошком нагревали в электровакуумной печи СНВЭ—1.31/16—И4 до температуры 1200 °С при времени выдержки 15 мин. Электронно-пучковую обработку полученных заготовок проводили с длительностью импульса $2-4$ мкс. Образцы облучались при высокой энергии электронов, равной 30 кэВ, при этом плотность энергии составляла $E_s \approx 6$ Дж/см^2 , количество импульсов обработки равно 30. Изучение макро- и микроструктуры проводили методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) на системе с электронным и сфокусированным ионным пучками `Quanta 200 3D` в режиме вторичных электронов при ускоряющих напряжениях $20-30$ кВ. Элементный состав фаз определяли с помощью энергодисперсионного спектрометра `EDAX ECON IV`.

Показано, что электронно-пучковая обработка порошкового сплава TiNi, полученного методом гидридно-кальциевого восстановления, приводит к формированию более однородной структуры поверхности материала по сравнению с исходной макро- и микроструктурой. Отмечается изменение морфологии поверхности отдельных частиц порошка, что выражается в сглаживании рельефа поверхности и залечивании макродефектов (поры, трещины) на их поверхности. Наблюдается растворение частиц вторичных фаз Ti_2Ni и Ti_4Ni_2(O,N,C) в процессе перекристаллизации. Это должно положительно повлиять на коррозионные свойства материала, так как данные частицы являются источниками питтинговой коррозии при знакопеременных нагрузках в агрессивных средах, к которым в том числе относятся тканевые жидкости организма человека.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-79-10045, https://rscf.ru/project/19-79-10045/.

1. K. Otsuka, X. Ren., Prog. Mater. Sci. **5**, 511 (2005).

2. Л.Л. Мейснер *и др.*, Изв. высш. уч. зав. Физика **7/2**, 159 (2016).

Структурные изменения в высокоазотистой аустенитной стали после горячей пластической деформации

А.В. Ким[1]*, С.А. Аккузин[2], И.Ю. Литовченко[1,2], Д.С. Кушнерева[3]
[1]Томский государственный университет, Томск, Россия
[2]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия
[3]ОАО Научно-исследовательский институт металлургической технологии, Ижевск, Россия
*e–mail: kim.a.v@stud.tsu.ru

Легирование аустенитных сталей азотом позволяет получить стабильную аустенитную структуру в широком диапазоне температур в комплексе с повышенными прочностными свойствами по сравнению с хромоникелевыми аустенитными сталями. Высокая эффективность упрочнения азотом достигается реализацией всех механизмов упрочнения: деформационного, твердорастворного, дисперсионного и зернограничного [1]. В настоящее время использование термомеханических обработок (ТМО) для азотистых сталей является перспективным и недостаточно исследованным направлением [2].

В данной работе была исследована высокоазотистая аустенитная сталь ВНС-53-Ш (08Х21Г11АН6). Исходное состояние стали получено отжигом при 1100 °С с выдержкой в течение часа и последующей закалкой в воду. Было исследовано влияние горячей пластической деформации прокаткой с предварительным нагревом в печи до 1100 °С с выдержкой в течение 10 мин. (степень деформации 70% за 2 прохода). После каждого прохода обработки образцы закаливали в воду.

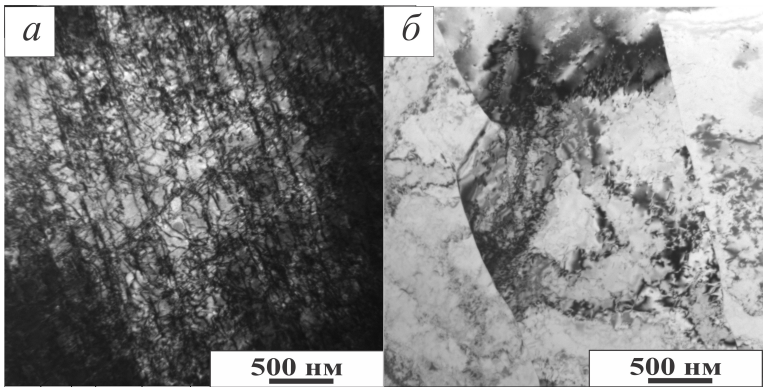


Рис. 1. Микроструктура стали ВНС-53-Ш. (а)-исходное состояние; (б)-состояние после ТМО.

Электронно-микроскопические исследования показали, что исходная микроструктура стали представлена аустенитными зернами, δ-феррит не был обнаружен. Внутри зерен аустенита обнаружены планарные дислокационные субструктуры (рис. 1а), дефекты упаковки и двойники отжига. Наблюдаются отдельные нитридные частицы (CrN, VN) размерами менее 1 мкм.

После ТМО в микроструктуре стали обнаружена фрагментация зерен с формированием множества малоугловых границ разориентаций (рис. 1б). Проведенная ТМО обеспечивает повышение предела текучести стали в ≈ 1.9 раза по сравнению с исходными значениями (450 МПа). При этом относительное удлинение уменьшается от $\approx 41\%$ до $\approx 1\%$.

1. А.Г. Свяжин, Л.М. Капуткина, Черная металлургия **62**, 173 (2019).
2. I.O. Bannykh, Russ. Metall. **2016**, 972 (2016).

Кинетика твердофазных реакций восстановления металлов из вторичной пыли дуговых электропечей

Л.Ю. Коваленко[1]*, А.П. Анзулевич[1], Д.А. Калганов[2]
[1]Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
[2]Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
*e–mail: lkovalenko90@mail.ru

При работе дуговых электропечей образуется отход производства четвертого класса опасности — пыль. Это мелкодисперсный порошок, который содержит ценные металлы (Mg, Ca, Fe, Zn и Pb) в виде оксидов, силикатов и других солей. Актуальной задачей является поиск экономически выгодного и экологически безопасного способа восстановления металлов. Целью работы было исследование кинетики восстановления металлов из вторичной пыли дуговых электропечей биочаром.

Восстановление металлов проводили в трубчатой печи в воздушной атмосфере. Для этого навески пыли смешивали с различным количеством восстановителя и помещали в кварцевую кювету, которая была подсоединена к микроволюметру. Фиксировали объём выделившегося газа от времени реакции при изотермическом нагреве ($T = 800$; 900°C).

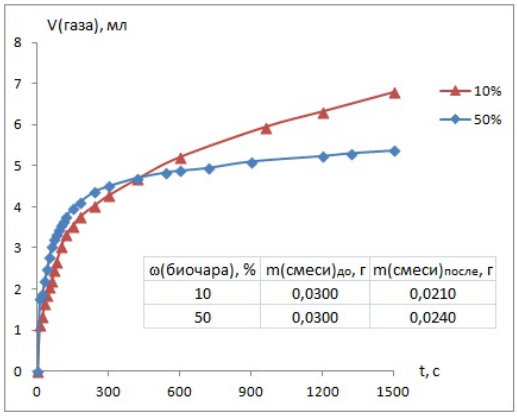


Рис. 1. График зависимости объёма выделившегося газа от времени протекания реакции при 800°C, массовая доля биочара в смеси: 10 и 50%. В таблице указаны массы смеси до и после протекания реакции.

На зависимости объёма выделившегося газа от времени можно выделить два участка (рис. 1): резкое увеличение объёма выделившегося газа в начальный момент времени и плато при $t > 300$ с. Разный наклон кривых после $t > 300$ с может быть связан с различной удалённостью частиц оксида металла и углерода друг от друга.

При восстановлении металлов в воздушной среде должны протекать реакции окисления C до CO и CO_2. Однако то, что масса смеси с 50% биочара после нагрева больше, чем при 10% косвенно подтверждает протекание основной реакции — восстановление металлов. В приближении модели объёмного реагирования [1] определено: энергия активации при $t < 300$ с имеет близкие значения для смеси с 10% и с 50% биочара, 69 ± 1 КДж/моль и 66 ± 1 КДж/моль соответственно. При $t > 300$ с энергия активации для смеси с 10% увеличивается (98 ± 1 КДж/моль), что вероятно связано с недостатком биочара; а для смеси с 50% уменьшается (55 ± 1 КДж/моль): по-видимому, удаление первых газообразных продуктов реакции увеличивает реакционную поверхность частиц пыли и биочара.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Государственного фонда естественных наук Китая в рамках научного проекта № 21-58-53044.

1. А.Г. Коротких, К.В. Слюсарский, Химическая физика и мезоскопия **1**, 20 (2017).

Сверхтвердые смесевые бориды переходных металлов со структурой типа WB_{5-x}

Н.А. Мацокин[1,2,3]*, А.Г. Квашнин[3]

[1]Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
[2]ООО Кинтех Лаб, Москва, Россия
[3]Сколковский институт наук и технологий, Москва, Россия
*e–mail: nikita@matsokin.ru

Известно, что бориды переходных металлов являются основой для создания химически инертных, твердых и прочных материалов [1]. Наиболее развивающимся направлением является изучение высшего борида вольфрама WB_{5-x}, который был теоретически предсказан и экспериментально синтезирован [2,3]. Твердость борида вольфрама составила до 46 ГПа под нагрузкой 0.49 Н [2].

Наличие научных работ по родственным соединениям карбидов переходных металлов показало наличие эффекта термодинамической стабилизации соединений переходных металлов за счет однородного распределения металлов по структуре кристалла [4]. Важно также изучить, какие именно переходные металлы больше влияют на стабилизацию в отличие от других. В виду информации о механических характеристиках пентаборида вольфрама и изученных высокоэнтропийных материалов на основе карбидов переходных металлов можно предположить, что высший борид вольфрама WB_{5-x} с примесями других переходных металлов будет проявлять уникальные механические свойства за счет разницы свойств отдельных переходных металлов и их гомогенизации в кристаллической решетки.

Все расчеты проводились с использованием программы `VASP` [5] в рамках теории функционала плотности с обменно-корреляционным функционалом Perdew-Burke-Ernzerhof [6]. Для изучения влияния примеси переходного металла на структуру высшего борида вольфрама была использована структурная модель $WB_{4.2}$ [3] была построена 1×1×2 суперячейка в которой часть атомов W была заменена на другой переходный металл. Разупорядоченные по металлу структуры конструировались посредством использования специального метода поиска квазислучайных структур [7]. Были рассмотрены 8 переходных металлов 4-6 групп таблицы Менделеева, а именно: Ti, V, Cr, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta. Содержание примеси варьировалось от 10 до 100% с шагом в 10%. Для связывания структуры и её стабильности для каждого состава были рассчитаны энтальпии смешения и изменение параметра решетки по сравнению со структурой чистого борида, как было предложено в работе [4]. Наименьшая энтальпия смешения оказалась для структуры с 30% Ti в структуре, т.е. $W_{0.7}Ti_{0.3}B_{4.2}$. Для полученной структуры было проведено исследование механических характеристик с использованием библиотеки `elastool` [8] и сравнение с чистым пентаборидом вольфрама.

В результате было показано изменение механических свойств за счет термодинамически выгодной примеси в исходную структуру $WB_{4.2}$.

1. Z. Zhang *et al.*,The J. of Phys. Chem. C. **124(8)**, 4430 (2020).
2. Q. Gu *et al.*, Adv. Mat. **20(19)**, 3620 (2008).
3. A. G. Kvashnin *et al.*, Adv. Sci. **7(16)**, 2000775 (2020).
4. L. Shi-Yu *et al.*, J. of Appl. Phys. **131(7)**, 075105 (2022).
5. G. Kresse *et al.*, Phys. rev. **59(3)**, 1758 (1999).
6. J. P. Perdew *et al.*, Phys. rev. **54(23)**, 16533 (1996).
7. A. O. Lyakhov *et al.*, Comp. Phys. Com. **181(9)**, 1623 (2010).
8. Z-L. Liu *et al.*, Comp. Phys. Com. **270**, 108180 (2022).

Исследование механических свойств образцов пористого нитинола с разной морфологией

Г.А. Никифоров*, Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
*e–mail: nikiforov121998@mail.ru

Сегодня широкое применение находят смарт-материалы за счет своих уникальных физико-механических свойств [1]. К таким материалам относится никелид титана $Ti_{50}Ni_{50}$, также известный как нитинол, который относится к материалам с памятью формы. Нитинол выделяется среди своих аналогов крайне высокой степенью восстановления формы (до 8% при продольных деформациях) и биосовместимости. Благодаря биосовместимости никелид титана активно используется для изготовления имплантов [2]. Особый интерес для медицины представляют импланты на основе пористого нитинола, т.к. морфология этого материала улучшает вживление импланта в организм человека. Существенным недостатком пористых материалов являются пониженные механические характеристики. Разработанный нами способ получения аморфных пористых материалов [3] позволяет улучшить прочностные характеристики. Однако материал становится более хрупким и теряет способность к эффекту памяти формы. В своей работе мы ставили цель найти способ компенсировать этот недостаток при сохранении пористости материала и среднего размера пор.

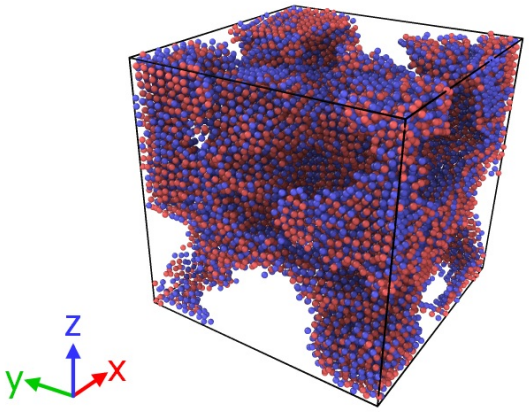


Рис. 1. Модель пористого нитинола с линейным размером 9 нм с равномерным распределением кристаллической матрицы.

Для решения поставленной задачи мы смоделировали образец нитинола с равномерным распределением кристаллической матрицы по направлению деформации, что теоретически позволит более равномерно распределить нагрузку, снизив максимальное напряжение в образце. В нашей работе мы использовали метод моделирования молекулярной динамики, т.к. получение подобной структуры на эксперименте крайне трудоемко. Для получения модели пористого образца нами был разработан оригинальный алгоритм генерации пористой структуры с заданной пористостью и размерами пор. С помощью этого алгоритма нами получены пористые структуры с пористостью 55% и размерами пор 2-6 нм с равномерным и неравномерным распределением пористой матрицы (рис. 1). Полученные модели были подвергнуты растяжению с целью получения информации о механических характеристиках. В результате симуляционного эксперимента было обнаружено, что предел прочности в случае равномерного распределения кристаллической матрицы вырос примерно в 1.5 раза.

Работа выполнена при поддержке программы "Приоритет-2030". Авторы признательны Фонду развития теоретической физики и математики "БАЗИС" (проект № 20-1-2-38-1).

1. R. Bogue , Assembly Automation **6**, 755 (2019).

2. T. Duerig *et al.*, Materials Science and Engineering **273**, 149 (1999).

3. B.N. Galimzyanov *et al.*, ФММ **137**, 1149 (2020).

Дефектность в медной подрешетке в твердых растворах $CuCr_{1-x}Zr_xSe_2$

М.С. Постников[1,2]*, А.А. Титов[1,5], С.В. Пряничников[4], А.Н. Титов[1,3]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия
[3]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[4]Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[5]Уральский государственный экономический университет, Екатеринбург, Россия
*e–mail: mithanya0403@gmail.com

Мультиферроик $CuCrSe_2$ имеет структуру близкую к структуре делафоссита. Выше температуры 90°C $CuCrSe_2$ переходит в центросимметричную (ЦС) фазу, в которой атомы меди распределены по обоим наборам тетрапозиций. А ниже этой температуры решетка не имеет центра симметрии, а значит, способна к электрической поляризации. Переход в сегнетоэлектрическую фазу совпадает с переходом в ферримагнитную фазу.

Синтез материалов $CuCr_{1-x}Zr_xSe_2$ ($0 \leqslant x \leqslant 0.25$) проведен методом твердофазной реакции. Замещение хрома на цирконий позволяет сохранить тетраэдрическую координацию меди. Из-за разности валентности Cr и Zr может присутствовать механизм компенсации заряда, связанный с дефицитом меди. Наличие такого механизма свидетельствует о наличии ковалентной составляющей химической связи меди с решеткой.

Рентгенограммы порошков были получены на дифрактометре (`Brucker D8` и `Rigaku D-MAX-2200V`). Уточнение кристаллической структуры было выполнено с использованием программного пакета `GSAS II` (General Structure Analysis System II). Полученные образцы индексируются в пространственных группах $R3m$ и $R\bar{3}m$. Из полнопрофильного анализа получена зависимость параметров решетки, которая хорошо объясняется тем, что при увеличении замещения циркония в подрешетке меди образуется дефицит (рис. 1).

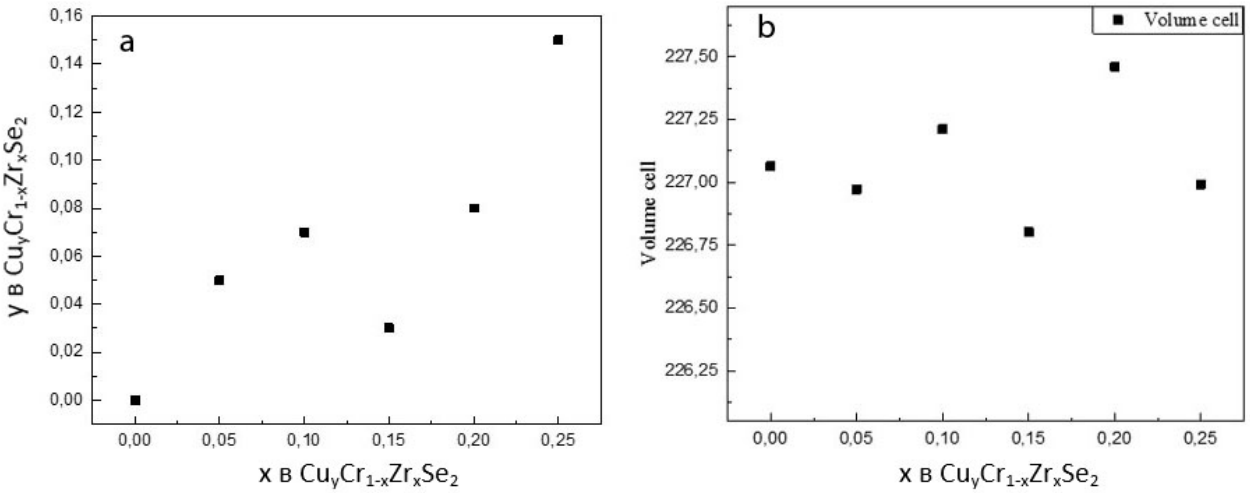


Рис. 1. Зависимость дефицита меди от содержания циркония в $CuCr_{1-x}Zr_xSe_2$ (a), зависимость объема элементарной ячейки от содержания циркония (b).

Замещение Cr на Zr приводит к дефициту по меди, который компенсирует заряд при замещении трехвалентного Cr на четырехвалентный Zr.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00361).

Устойчивость леннард-джонсовского ГЦК кристалла при отрицательных давлениях

Е.О. Розанов[1,2*], С.П. Проценко[1], В.Г. Байдаков[1]
[1]Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: vvecme10@gmail.com

При небольших растяжениях (перегревах) твердое тело устойчиво по отношению к бесконечно малым возмущениям параметров состояния. В эксперименте значительные перегревы кристалла наблюдаются крайне редко, поскольку разрушение регулярной структуры начинается с его свободной поверхности. Перегревы кристаллической фазы легко реализуются в молекулярных моделях, где свободная поверхность исключается использованием периодических граничных условий (ПГУ).

Устойчивость перегретого кристалла исследовалась методом молекулярной динамики (МД). Частицы ($N = 2048 - 108000$) размещались в узлах гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки в ячейке кубической формы с ПГУ. Взаимодействие между частицами описывалось парным потенциалом Леннард-Джонса (ЛД). Термодинамические и механические свойства кристалла рассчитывались в NVT ансамбле с использованием пакета МД моделирования LAMMPS [1].

Расчеты проводились по изотермам при приведенных температурах ниже температуры конечной точки линии плавления T_K [2] и отрицательных давлениях. Заход в метастабильную область осуществлялся поэтапным понижением плотности путем увеличения длины ребер ячейки и соответствующего масштабирования координат частиц. При каждом значении плотности свойства кристалла рассчитывались усреднением по 100000 шагов интегрирования уравнений движения частиц.

Пространственно однородные и неоднородные объемные флуктуации плотности определяются разными модулями упругости. Условия устойчивости кубического кристалла относительно однородных термических и механических возмущений выражаются системой неравенств $K > 0$, $\mu > 0$ и $\mu' > 0$, где K — модуль всестороннего сжатия, $\mu > 0$ и $\mu' > 0$ – модули простого и тетрагонального сдвигов. Деформации и напряжения в твердом теле, вызываемые тепловым движением, как правило, являются неоднородными. При неоднородных деформациях модули упругости зависят от направления деформации. Для главных направлений ГЦК кристалла модуль одностороннего сжатия $\widetilde{K}[100] = K + \frac{4}{3}\cdot\mu'$, $\widetilde{K}[110] = K + \frac{1}{3}\cdot\mu' + \mu$, $\widetilde{K}[111] = K + \frac{4}{3}\mu$. Таким образом, в анизотропном твердом теле при $K = 0$, $\mu > 0$ и $\mu' > 0$ пространственно неоднородные флуктуации плотности будут конечными.

Моделирование показало, что при растяжении ЛД ГЦК кристалла, когда $T \leqslant T_K$, первым обращается в нуль модуль всестороннего сжатия K. При этом потери восстановительной реакции ГЦК кристаллом не происходит. Кристалл сохраняет свою устойчивость и в состояниях с $K < 0$. Кристаллическое упорядочение нарушается до достижения состояний, где $\widetilde{K} = 0$. Это происходит через зародышеобразование и рост новой фазы. Устойчивость кристалла относительно бесконечно малых неоднородных деформаций определяет модуль одностороннего сжатия $\widetilde{K}$. Экстраполяция модулей $\widetilde{K}$ к нулевому значению показывает, что первым становится равным нулю модуль $\widetilde{K}[110]$.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 18-19-00276, https://rscf.ru/project/18-19-00276/.

Моделирование проведено с использованием суперкомпьютера ИММ УрО РАН.

1. A.P. Thompson *et al.*, Comp. Phys. Comm. **271**, 108171 (2022).
2. V.G. Baidakov *et al.*, Phys. Rev. Lett. **95**, 015701 (2005).

Синтез и строение кристаллов в тройной системе $CsCl - CuCl_2 - H_2O$

Е.В. Сидорова*, Е.С. Смирнова, В.А. Коморников, О.А. Алексеева

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
*e–mail: soul7418@gmail.com

Соли переходных металлов, образующиеся в системе $CsCl - CuCl_2 - H_2O$, интересны как оптические, пьезоэлектрические, полупроводниковые, магнитные материалы, в том числе квантовые антиферромагнетики [1,2,3]. Соединения на основе меди демонстрируют разнообразные типы атомного упорядочения, что приводит к многообразию проявляющихся в них физических свойств.

В данной работе исследовались состав и строение серии кристаллов, выращенных из раствора в тройной системе $CsCl - CuCl_2 - H_2O$ при комнатной температуре. Исследуемые кристаллы были получены методом спонтанной кристаллизации при изотермическом выпаривании из растворов с соотношением исходных компонентов $CsCl:CuCl_2$ = 9:1; 8:2; 7:3; 6:4; 5:5; 4:6; 3:7; 2:8; 1:9 согласно диаграммам растворимости [4].

Полученные кристаллы были исследованы методом рентгенофазового анализа с использованием рентгеновского порошкового дифрактометра `Rigaku Miniflex600`. Установлено, что в точке $CsCl:CuCl_2$ = 9:1 сокристаллизуются фазы Cs_2CuCl_4 и CsCl, а в точке 1:9 фазы $CsCuCl_3$ и $CuCl_2 \cdot 2H_2O$. При соотношении $CsCl:CuCl_2$ = 6:4 в растворе сосуществуют две фазы: Cs_2CuCl_4 и $Cs_3Cu_2Cl_7 \cdot 2H_2O$. Фаза $Cs_3Cu_2Cl_7 \cdot 2H_2O$ имеет узкую область кристаллизации. При равном процентном соотношении компонентов в растворе обнаружены только кристаллы $CsCuCl_3$. В промежуточных областях кристаллизации с содержанием CsCl 80–70 % образуются фазы Cs_2CuCl_4 и CsCl, а при 40–20 % фазы $CsCuCl_3$ и $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ за счет смещения состава раствора к эвтонической точке и, вероятно, инконгруэнтного характера растворимости кристаллов $CsCuCl_3$ и Cs_2CuCl_4.

Рентгеноструктурный анализ отобранных из каждой серии монокристаллических образцов проводился при комнатной температуре с использованием дифрактометра `XtaLAB Synergy-DW` (Rigaku Oxford Diffraction). В ходе анализа было установлено, что в серии выращенных кристаллов присутствуют монокристаллические фазы: Cs_2CuCl_4, $Cs_3Cu_2Cl_7 \cdot 2H_2O$ и $CsCuCl_3$. Структуры изученных соединений были уточнены до итоговых факторов расходимости $R = 1.96 - 2.44\%$.

Структура Cs_2CuCl_4 принадлежит пространственной группе $Pnma$, $Z = 4$, параметры ромбической элементарной ячейки $a = 9.7570(1)$, $b = 7.6075(2)$, $c = 12.3924(2)$ Å. Структура состоит из искаженных тетраэдров $CuCl_4$, не связанных между собой, между которыми располагаются атомы цезия. Структура $Cs_3Cu_2Cl_7 \cdot 2H_2O$ принадлежит пространственной группе $P\bar{1}$, $Z = 2$, параметры триклинной элементарной ячейки $a = 8.9126(2)$, $b = 9.0597(2)$, $c = 11.8097(3)$ Å, $\alpha = 118.861(2)^\circ$, $\beta = 109.743(2)^\circ$, $\gamma = 89.701(2)^\circ$. Атомы меди образуют плоскую прямоугольную конфигурацию с тремя атомами хлора и молекулой воды в структуре, которая формирует зонтичную структуру с более удаленным атомом хлора. Между цепочками из зонтичных структур находятся атомы цезия. Структура $CsCuCl_3$ принадлежит пространственной группе $P6_522$, $Z = 6$, параметры гексагональной элементарной ячейки $a = b = 7.2116(1)$, $c = 18.1717(2)$ Å. Мотив структуры представляет собой цепочки бипирамид $CuCl_6$, между цепочками располагаются атомы цезия.

1. Т.Г. Головина *и др.*, Кристаллография **65**, 677 (2020).

2. H. Ueda *et al.*, Physical Review B **105**, 144408 (2022).

3. T. Herfurth *et al.*, Physical Review B **88**, 174404-1 (2013).

4. Л.В. Соболева, Выращивание новых функциональных кристаллов.—М.: Физматлит (2009).

Применение эмиссионной мессбауровской спектроскопии на ядрах ^{57}Co для исследования границ зёрен поликристаллического никеля

А.В. Столбовский[1]*, Д.Д. Кузнецов[2], Н.С. Чикунова[1], С.А. Мурзинова[1], Р.М. Фалахутдинов[1], А.Ю. Истомина[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
*e–mail: stolbovsky@imp.uran.ru

Границы зерен являются важным структурным элементом поликристаллических материалов, влияющим на объемные свойства [1]. Поэтому исследование ГЗ привлекает повышенное внимание исследователей и несмотря на большой объем уже имеющихся исследований, многие остаются открытыми.

Одним из методов исследования ГЗ является эмиссионная мессбауэровская (ядерная гамма-резонансная) спектроскопия, позволяющая определить наличие избыточного свободного объема, обусловленного дефектностью ближайшего окружения атома-зонда, что позволяет судить об отличии ближайшего окружения атома-зонда (его состоянии) в матрице и в интерфейсе (ГЗ) [2].

При этом все предыдущие исследования ГЗ методом эмиссионной мессбауровоской спектроскопии проводились на немагнитных материалах для того, чтобы исключить дополнительный анализ сверхтонкого взаимодействия, наблюдаемого при мессбауэровской спектроскопии магнитных материалов. В то же время анализ спектров магнитных материалов дополнительно усложняется использованием в эмиссионной мессбауэровской спектроскопии резонансных детекторов, искажающих форму линии.

Поэтому в данной работе ставилась задача провести исследование ГЗ чистого поликристаллического никеля, выбранного в качестве модельного материала, с целью разработки подходов в анализе эмиссионных мессбауэровских спектров, полученных на ядрах ^{57}Co.

В результате было разработано специальное программное обеспечение, позволяющее проводить анализ спектров, полученных с использованием резонансных детекторов. Которое позволяет описывать линии спектра с достаточной точностью, учитывая её искажения, вводимые резонансным детектором.

Также предложены подходы, позволяющие выделить компоненты спектра, отвечающие атомам-зондам, находящимся в матрице и связываемые с локализацией в объёмах, отвечающих ГЗ для различных температур отжига в интервале от 350 до 600 °C. Предложено использовать расчётные значения концентраций атомов ^{57}Co, определённые при анализе спектров в качестве дополнительного фактора, позволяющего судить о перераспределении атомов ^{57}Co между объёмами, ассоциируемыми с интерфейсами и матрицей.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», № 122021000035-6).

1. A.P. Sutton and R.W. Balluffi, Interfaces in Crystalline Materials, Clarendon Press, Oxford (1995).
2. В. В. Попов и др. ФММ **118**, 372 (2017).

Кристаллическая структура дихалькогенидов титана Co_xTiS_2 $(x = 0.1, 0.2)$

Н.В. Урусова[1]*, А.И. Меренцов[2,3], О.В. Бушкова[1]

[1]Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: natali.urusova@mail.ru

Дисульфид титана TiS_2 имеет кристаллическую структуру типа $1T - CdI_2$, которая описывается пространственной группой $P - 3m1$ с тригональной симметрией [1]. Дисульфид титана обладает широкой Ван-дер-Ваальсовской щелью, в которую можно внедрять (интеркалировать) атомы различных элементов и органических молекул. В частности, соединения M_xTiS_2 (M = щелочные или переходные $3d$ металлы) активно исследуются из-за их характерных физических свойств, зависящих от вида атома M и состава x [2,3]. Целью работы является исследование влияния интеркалации небольшого количества $3d$ металла на интеркалационную ёмкость TiS_2 по литию. На первом этапе были получены однофазные образцы и изучено влияние интеркалации кобальта на кристаллическую структуру TiS_2. Материалы Co_xTiS_2 $(x = 0.1, 0.2)$ были синтезированы твердофазным методом, отжиг образов проводился в вакуумированных кварцевых ампулах. Рентеноструктурные исследования были выполнены с помощью дифрактометра высокого разрешения `Shimadzu XRD-7000` при комнатной температуре. Расчёт рентгенограмм был выполнен методом Ритвельда в пакете программ `Fullprof` [4].

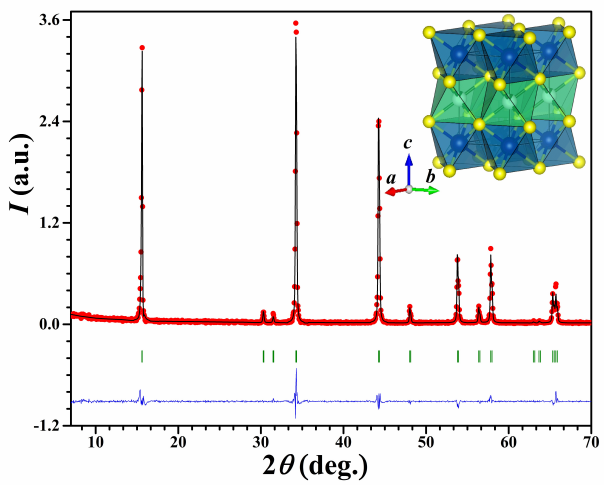


Рис. 1. Экспериментальная (точки), расчётная (линия) рентгенограммы $Co_{0.1}TiS_2$. Штрихи — угловые положения Брэгговских рефлексов. Внизу — разность между расчётом и экспериментом. Во вставке представлена кристаллическая структура $Co_{0.1}TiS_2$.

С помощью рентгенофазового (РФА) анализа было подтверждено, что изученные составы Co_xTiS_2 являются однофазными. Данные РФА для фазы $Co_{0.1}TiS_2$ хорошо описываются структурной моделью (пространственная группа P-$3m1$), в которой атомы кобальта полностью разупорядочены по октаэдрическим позициям. Рентгенограмма $Co_{0.1}TiS_2$ представлена на рис. 1. Кристаллическая структура соединения $Co_{0.2}TiS_2$ описывается в рамках пространственной группы $I2/m$ в отличие от $Co_{0.1}TiS_2$. Это указывает на то, что атомы кобальта упорядочиваются в октаэдрических позициях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-72-00094).

1. J.A. Wilson, A.D. Yoffe, Adv. Phys. **18(73)**, 193 (1969).
2. G. Guelou, P. Vaqueiro *et al.*, J. Mater. Chem. C **4**, 1871 (2016).
3. T. Kawasaki, K. Ohshima, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 044601 (2011).
4. CJ. Rodriguez-Corvajal, Phys. B **192**, 55 (1993).

Упругие свойства редкоземельных станнатов $R_2Sn_2O_7$ $(R = La - Lu)$: *ab initio* расчет

В.А. Чернышев[1]*, К.И. Глухов[1], П.А. Агзамова[2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: vchern@inbox.ru

Редкоземельные станнаты со структурой пирохлора привлекают внимание в течение ряда лет благодаря многообразию свойств и потенциальному применению в качестве люминофоров. Редкоземельные станнаты используются в качестве матриц для активации редкоземельными ионами [1]. Экспериментальные данные по упругим постоянным в научной печати есть только для нескольких станнатов [2]. В работе в рамках единого *ab initio* подхода проведен расчет упругих постоянных для всего ряда редкоземельных станнатов $R_2Sn_2O_7$ $(R = La - Lu)$. Рассчитаны модули упругости и твердость. Расчеты проведены в рамках теории функционала плотности, с гибридным функционалом PBE0 [3], учитывающим как локальный, так и нелокальный обмен в формализме Хартри–Фока. Для расчетов использована программа CRYSTAL17 [4], предназначенная для моделирования периодических структур в рамках МО ЛКАО подхода. Для описания внутренних оболочек редкоземельных ионов, по $4f$ включительно, были использованы квазирелятивистские псевдопотенциалы ECPnMWB [5], что позволяет существенно сократить затраты машинного времени. В работе показана возможность описывать внутренние оболочки редкоземельных ионов, по $4f$ включительно, посредством псевдопотенциала, при расчете кристаллической структуры и упругих свойств редкоземельных станнатов. Результаты расчета хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными и дополняют их.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № FEUZ-2020-0054). При проведении работ был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН.

1. A.A. Saleh *et al.*, Materials Science in Semiconductor Processing **88**, 256 (2018).
2. J. Feng *et al.*, Appl. Phys. Lett. **99**, 201909 (2011).
3. J.P. Perdew *et al.*, J. Chem. Phys. **105**, 9982 (1996).
4. CRYSTAL17 a computational tool for solid state chemistry and physics. http://www.crystal.unito.it/index.php.
5. Energy-Consistent Pseudopotentials of the Stuttgart/Cologne Group. http://www.tc.uni-koeln.de/PP/clickpse.en.html.

Исследование поверхности электрохимического травления ультрамелкозернистого никеля, полученного кручением под высоким давлением, с помощью сканирующей туннельной микроскопии

Н.С. Чикунова*, А.В. Столбовский, С.А. Мурзинова, Р.М. Фалахутдинов, И.В. Блинов, А.Ю. Истомина

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

Изучение объемных металлических материалов с ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой представляет большой интерес в связи с их исключительными свойствами, такими как прочность, вязкость, способность к демпфированию, по сравнению с их крупнозернистыми аналогами. Основным способом формирования УМЗ структуры в металлических материалах является использование методов интенсивной пластической деформации (ИПД) [1-3].

Считается, что границы зерен (ГЗ) являются основным элементом структуры, влияющим на характеристики объемных металлических материалов. В настоящее время наиболее используемыми методами исследования зеренной структуры являются просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ), сканирующая электронная микроскопия с дифракцией обратного рассеяния электронов (EBSD), а также атомно-силовая микроскопия (АСМ). Однако изложенные методы имеют как свои преимущества, так и недостатки. В работе [4] был предложен альтернативный подход, основанный на использовании химического травления и сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) при исследовании УМЗ материалов. Однако используемые методики в СТМ позволяют проводить только качественный анализ структуры.

Поэтому в настоящей работе ставилась задача разработать подходы по глубокому анализу данных СТМ. В качестве модельного материала был выбран монокристаллический никель, подверженный кручению под высоким давлением (КВД) до стадии насыщения за 5 оборотов при комнатной температуре.

Разработана методика подготовки образцов. Предложены методы как качественной, так и количественной оценки зеренной структуры ультрамелкозернистого никеля, полученного кручением под высоким давлением, на основе анализа СТМ-изображений поверхности электрохимического травления. Исследована структура УМЗ никеля.

Показано, что анализ СТМ-изображений рельефа травления материалов с УМЗ структурой аналогичен металлографическому анализу крупнозернистых поликристаллов. Поскольку элементы структуры имеют размеры порядка 100 нм, для повышения достоверности результатов анализа были предложены алгоритмические методы фильтрации изображения, что позволяет более четко выявить зернограничную структуру. Результатом обработки является изображение с сетью канавок ГЗ.

Кроме того, было показано, что предложенная методика подготовки образцов путем электрохимического травления позволяет проводить анализ энергии ГЗ по рельефу травления. Были получены данные об относительной энергии ГЗ УМЗ никеля.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», № 122021000035-6).

1. R.Z. Valiev *et al.*, Progress in Materials Science **45**, 103 (2000).

2. T.G. Langdon, Acta Materialia **61**, 7035 (2013).

3. Y. Estrin, A. Vinogradov, Acta Materialia **61**, 782 (2013).

4. P.V. Kuznetsov *et al.*, Physics of Metals and Metallography **118**, 241 (2017).

Теплофизические, электронные и оптические свойства газогидратов: результаты *ab-initio* моделирования

М.Б. Юнусов[1]*, Р.М. Хуснутдинов[1,2]

[1]Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
[2]Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
*e–mail: mukhammadbek@mail.ru

Газовые гидраты, представляющие собой нестехиометрические молекулярные комплексы по типу «гость-хозяин», имеют огромный экономический потенциал и вызывают большой интерес со стороны исследователей. Клатратная водная решетка гидрата уникальна (1 м^3 кристаллической формы гидрата sI может удерживать в себе до 160 м^3 метана), что может быть использовано для разработки технологий хранения и транспортировки водорода. Кроме того, гидраты, содержащие в качестве газа метан и этан, могут стать главным источником топлива после исчерпания нефтегазовых источников [1], в недрах Земли заключено более 10^{16} природного газа в форме гидратов.

В настоящей работе, с использованием высокоточного квантово-механического метода функционала плотности [2], была исследована стабилизация водного каркаса гидрата молекулами газа. Рассчитаны энергии связи газов CH_4, H_2S, N_2, Ar, Kr, Xe, CO_2, C_2H_6, C_3H_6 в водных клатратных полостях D- и T- типа, показано, что небольшие молекулы CH_4, H_2S, Xe и H_2 лучше стабилизируют и обеспечивают термодинамическую устойчивость D-полостей, в то время как большие T-полости стабилизируются молекулами CO_2, C_2H_6, C_23H_6. Была исследована зависимость энергии связи газов в гидратах в зависимости от массы, размеров и ориентации гостевых молекул. Кроме того, были рассчитаны теплоемкости гидратов sI и sH в диапазоне T = [180; 260] K. Принимая во внимание то, что самым простым способом добычи газа из гидратов, является их нагрев, с последующей диссоциацией и высвобождением газа, полученные данные о теплофизических свойствах и механизмах устойчивости клатратных соединений позволят значительно усовершенствовать технологии разработки и добычи в газогидратных месторождениях. В работе также были исследованы электронные свойства кристаллических решеток гидратов sI, sH и гидрата метана sI: получены зонные структуры $E(\mathbf{k})$; плотности электронных состояний $N(E)$; рассчитаны тензоры диэлектрической проницаемости ϵ_{ij}. Более того, были рассчитаны частотно-зависимые комплексные диэлектрические функции $\epsilon^1(\omega)$ и $\epsilon^2(\omega)$, на основе которых получены важнейшие электрооптические функции кристаллических форм гидратов (рис. 1) [3].

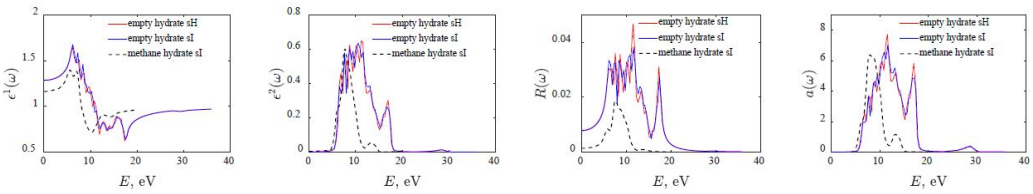


Рис. 1. Диэлектрические функции $\epsilon^1(\omega)$ и $\epsilon^2(\omega)$, функции отражения $R(\omega)$ и поглощения $\alpha(\omega)$ для незаполненных гидратов sI и sH, а также для гидратов метана sI

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского (Приволжского) федерального университета. Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-22-00508).

1. E.D. Sloan, C.A. Koh, Clathrate Hydrates of Natural Gases, CRC Press (2007).
2. G. Kresse, J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1999); **99**, 201909 (2011).
3. L. Sun *et al.*, Journal of Applied Physics **108**, 093519 (2010).

Неразрушающий контроль

Анизотропия магнитных свойств образцов из коррозионно-стойкой стали GP1, изготовленных с помощью селективного лазерного сплавления

Н.В. Гордеев[1,2]*, А.Н. Сташков[1], Е.А. Щапова[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: Gordeev.Nikita@urfu.me

Селективное лазерное сплавление (СЛС) является одной из аддитивных технологий 3D печати металлами. Технология СЛС используется для получения деталей различной формы, которые как правило не подвергаются дальнейшей механической обработке. Исследование механических свойств и структуры изделий, а также магнитных параметров в зависимости от направления выращивания образцов из этих сталей, после разных термических обработок (ТО) вызывает большой интерес. Одной из проблем технологии СЛС является то, что в процессе изготовления в детали возникают остаточные механические напряжения. Для снятия внутренних механических напряжений можно применять термическую обработку. Однако режим ТО не является универсальным и для каждого материала режимы ТО должны подбираться индивидуально. В случае ферромагнитных сталей, полученных методом селективного лазерного сплавления, контроль качества до и после термообработок может проводиться магнитными неразрушающими методами, так как магнитные свойства чувствительны к фазовым и структурным изменениям, а также к механическим напряжениям. Целью данной работы является экспериментальное изучение магнитных свойств в разных направлениях относительно направления построения образцов из коррозионно-стойкой стали GP1, изготовленных методом селективного лазерного сплавления, до и после термических обработок.

Эксперименты проводились на образцах из коррозионно-стойкой стали GP1 (15-17.5% Cr, 3-5% Ni, 3-5% Cu, $\leqslant$1% Mn, $\leqslant$1% Si, $\leqslant$0.5% Mo, 0.15-0.45% Nb, $\leqslant$0.07% C). Образцы были изготовлены по технологии СЛС из исходного порошка, размер фракции которого составлял 10-40 мкм. Образцы имели форму цилиндра с диаметром 75 мм и высотой 15 мм. После изготовления часть из них отжигалась при 1050°C в течение 30 минут, один из образцов подвергся дополнительной термической обработке (старению при температуре 650°C в течение 4 часов). Коэрцитивная сила измерялась на коэрцитиметре КИФМ-1Н. Полевые зависимости дифференциальной магнитной проницаемости измерялись с помощью мобильного магнитометрического комплекса [1]. В качестве первичного преобразователя использовался приставной электромагнит с П-образным магнитопроводом. Измерения магнитных свойств проводили в разных направлениях относительно направления построения образцов на 3D принтере.

Уставлено, что в образце без термической обработки максимальные значения коэрцитивной силы и положения максимумов дифференциальной магнитной проницаемости наблюдаются в направлении, перпендикулярном построению образцов в лазерном 3D-принтере, а минимальные значения - вдоль направления построения. В образце с одной термической обработкой (1050°C, 30 минут) уменьшаются коэрцитивная сила и положение пика дифференциальной магнитной проницаемости и образец становится более однородным по магнитным свойствам из-за релаксации внутренних напряжений. Двойная термическая обработка (1050°C, 30 минут и старение при 650°c в течение 4 часов) привела к увеличению магнитной анизотропии стального образца. Установление причин данного факта требует проведения структурных исследований.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Диагностика», №122021000030-1).

1. А.Н. Сташков, Е.А. Щапова, А.П. Ничипурук, Научное приборостроение **29**, 47 (2019).

Оперативная диагностика фазового состава и выявление анизотропии магнитных свойств в изделиях из аустенитных коррозионно-стойких сталей

А.В. Кочнев*, М.Б. Ригмант, М.К. Корх
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: kochnevav@imp.uran.ru

Качество аустенитных сталей зависит от фазового состава, который может изменяться во время эксплуатации с образованием фазы мартенсита деформации. Ограничением использования намагниченности насыщения для контроля фазового состава является необходимость создания сильных магнитных полей и наличия образцов определённых размеров. В работе [1] было показано, что для контроля содержания феррита или мартенсита в двухфазных аустенитных сталях можно использовать комплекс характеристик, получаемых из частных петель магнитного гистерезиса, снятых на установке Remagraph C-500. Наиболее информативным из исследуемых параметров оказалась дифференциальная магнитная восприимчивость, которая была получена путем дифференцирования восходящих ветвей петель гистерезиса. Величина пика зависимости $\chi_{dif}(H)$ связана с величиной содержания конкретной ферромагнитной фазы (рис.1), в то время как положение пика — с типом фазы (рис. 2). Для получения зависимостей достаточно создания магнитных полей напряженностью 300–600 А/см. Далее авторами был использован приставной датчик в рамках экспериментальной установки для возможного проведения измерений на готовых изделиях. Результаты, полученные на экспериментальной установке, хорошо согласуются с результатами работы [1]

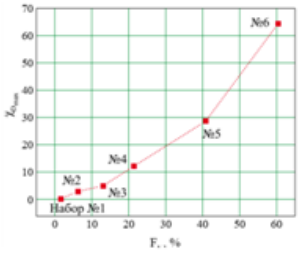


Рис. 1. Зависимости максимумов χ_{dif} от содержания фазы феррита.

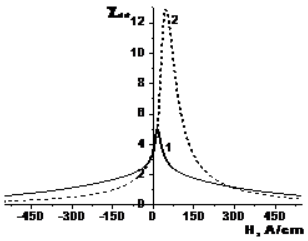


Рис. 2. Зависимости χ_{dif}(H) для образцов с содержанием феррита 13% (1) и мартенсита 12.5% (2).

Кроме того, исследования прокатанных образцов стали 09Х17Н5Ю прибором «ФерроКОМПАС» показали, что вместе с образованием фазы мартенсита деформации формируется ограниченная текстура прокатки, что приводит к анизотропии величины магнитной проницаемости в зависимости от направления намагничивания [2]. Это дает возможность качественного обнаружения опасной фазы мартенсита при его относительно малом содержании.

Таким образом была предложена методика контроля фазового состава двухфазных аустенитных сталей с использованием приставного датчика путём использования комплекса магнитных характеристик, основная из которых — максимальная дифференциальная магнитная восприимчивость. Кроме того, было показано, что образование мартенсита деформации приводит к возникновению анизотропии магнитной проницаемости, что можно использовать для обнаружения мест зарождения опасной фазы мартенсита

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Диагностика», № АААА-А18-118020690196-3)

1. M.K. Korkh, M.B. Rigmant, E.Yu. Sazhina, A.V. Kochnev, Russian journal of nondestructive testing **55**, 837 (2019).
2. M.B. Rigmant, N.V. Kazantseva, A.V. Kochnev, Yu.N. Koemets, M.K. Korkh, M.S. Karabanalov, Russian journal of nondestructive testing **57**, 1113 (2021).

Магнитные свойства образцов из стали 09Г2С, изготовленных с помощью лазерного 3*D*-принтера, до и после малоцикловых испытаний

А.Н. Сташков*, Е.А. Щапова, Н.В. Гордеев, А.П. Ничипурук
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: stashkov@imp.uran.ru

Лазерная 3*D* печать все чаще применяется для изготовления стальных деталей. С помощью селективного лазерного сплавления (СЛС) из металлического порошка возможно получить детали сложной формы без дальнейшей механической обработки. Механические свойства напечатанных деталей зачастую сравнимы с аналогичными свойствами литых деталей. При этом как правило требуется проводить предварительную термообработку деталей после печати. Поведение свойств, в частности магнитных, напечатанных на 3D-принтере сталей при циклических испытаниях на сегодняшний день недостаточно изучено. Целью данной работы являлось экспериментальное изучение магнитных свойств образцов из стали 09Г2С, изготовленной методом селективного лазерного сплавления, до и после циклических испытаний.

Эксперименты проводились на образцах из конструкционной низколегированной стали 09Г2С (0.1% C, 1.5% Mn, <1% Si). Образцы были изготовлены на лазерном 3D-принтере методом СЛС из стального порошка. В качестве образцов сравнения использовали литые образцы из стали 09Г2С. Размеры образцов составляли 2×3×120 мм. Часть образцов подвергали нормализации при 980°С (выдержка 30 минут). Измерения магнитных свойств (коэрцитивной силы H_c, остаточной магнитной индукции B_r, максимальной магнитной проницаемости μ_{max}, магнитоупругого поля H_σ) проводили на магнитометрической установке Remagraph C-500 и установке для изучения магнитоупругого эффекта [1]. Малоцикловые испытания проводились согласно ГОСТ 25.502-79 при «мягком» типе нагружения. К образцам прикладывалась растягивающая нагрузка, превышающая предел упругости, по достижении которой проводили уменьшение нагрузки до нуля. Частота циклирования по схеме «нагрузка-разгрузка» составляла ~ 0.05 Гц.

Установлено, что основные изменения магнитных свойств (H_c, B_r, μ_{max}) как литой, так и СЛС стали наблюдаются на начальном этапе малоцикловых испытаний, дальнейшее увеличение количества циклов (вплоть до разрушения испытуемых образцов) не приводит к существенному изменению магнитных свойств. Несмотря на разницу магнитных свойств образцов в исходном недеформированном состоянии, в конце малоцикловых испытаний коэрцитивная сила, остаточная магнитная индукция и максимальная магнитная проницаемость литой и СЛС сталей становятся практически равными. Характер изменения магнитоупругого поля H_σ, определенного из экспериментальных полевых зависимостей обратимой магнитной проницаемости, во время малоцикловых испытаний для литой и СЛС сталей кардинально различается: для литой стали 09Г2С магнитоупругое поле H_σ практически не меняется с увеличением числа циклов вплоть до разрушения образца, тогда как для стали 09Г2С, изготовленной с помощью СЛС, на первых циклах испытаний наблюдается резкое возрастание величины H_σ на 30%, что скорее всего связано с возрастанием остаточных механических напряжений. Дальнейший рост H_σ не столь существенен (около 8%).

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Диагностика», №122021000030-1).

1. A.N. Stashkov *et al.*, NDT&E Int. **118**, 102398 (2021).

Теплофизика

Капиллярная постоянная и поверхностное натяжение растворов гелия и водорода в *н*-бутане

В.Н. Андбаева
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e–mail: andbaeva@mail.ru

При постоянстве температуры T экспериментально определена капиллярная постоянная a^2 растворов *н*-бутан–гелий и *н*-бутан–водород при давлениях от давления насыщения чистого *н*-бутана p_{s0} до 4 МПа. Измерения с раствором *н*-бутан–гелий проведены в интервале температур $(0.75-0.96)\,T_c$, с раствором *н*-бутан–водород — $(0.32-0.96)\,T_c$, где $T_c = 425.125$ К [1] — температура в критической точке *н*-бутана. Для раствора *н*-бутан–водород, используя данные о фазовом равновесии раствора [2-4], был определен состав жидкой и газовой фаз раствора и рассчитано поверхностное натяжение γ. Для раствора *н*-бутан–гелий, ввиду отсутствия экспериментальных данных об ортобарических плотностях, расчет поверхностного натяжения не проводился. Результаты экспериментов приводятся на рис. 1 и рис. 2.

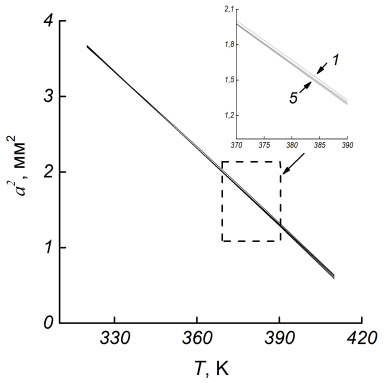


Рис. 1. Температурная зависимость капиллярной постоянной раствора *н*-бутан–гелий при постоянном давлении: 1 — $p = 0.5$ МПа; 2 — 1.0; 3 — 2; 4 — 3; 5 — 4.

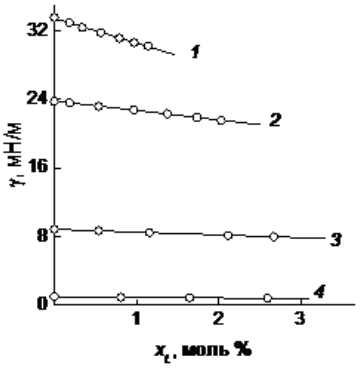


Рис. 2. Концентрационная зависимость поверхностного натяжения раствора *н*-бутан–водород: 1 — $T = 138.15$ К; 2 — 205.15; 3 — 348.15; 4 — 408.15.

Для раствора *н*-бутан–водород поверхностное натяжение во всем температурном интервале от тройной до критической точки ниже, чем у чистого *н*-бутана. Малые добавки гелия в *н*-бутан приводят к иному результату. Тут вблизи критической точки растворителя поверхностное натяжение раствора возрастает, т.е. гелий выступает как инактивная добавка.

1. D. Bücker, W. Wagner, J. Phys. Chem. Ref. Data **35**, 929 (2006).
2. E.E. Nelson, W.S. Bonnell, Ind. Eng. Chem. **35**, 204 (1943).
3. H.J. Aroyan, D.L. Katz, Ind. Eng. Chem. **43**, 185 (1951).
4. A.E. Klink, H.Y. Cheh, E.H. Amick Jr., AIChE Journal **21**, 1142 (1975).

Уравнение состояния вольфрама вблизи фазового перехода жидкость — пар

К.А. Боярских[1,2,3*], К.В. Хищенко[1,2,3,4]

[1]Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
[2]Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия
[3]Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия
[4]Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия
*e–mail: shagom55@gmail.com

В настоящей работе получены уравнения состояния вольфрама на основе трех простых термодинамических моделей. Первая модель основана на уравнении Ван-дер-Ваальса:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}, \tag{1}$$

где P — это давление; T — температура; V — удельный объем; $R = R_A/\mu$; $R_A = 8.314$ Дж/(моль·К) — универсальная газовая постоянная; μ — молярная масса; a и b — константы (параметры).

Вторая модель приводит к уравнению состояния, полученному при рассмотрении модельной задачи заряженных твердых сфер из работы [1]:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^{4/3}}, \tag{2}$$

Третья модель задает уравнение состояния системы взаимодействующих точечных центров [2]:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+\chi\beta)}. \tag{3}$$

В (3) параметры a и b имеют тот же смысл, что и в (1), а χ — управляющий параметр.

Для получения параметров уравнений состояния использовались экспериментальные данные по изобарическому расширению вольфрама. Эти параметры варьировались в широком диапазоне, и по каждому набору рассчитывалась изобара давления, соответствующего условиям эксперимента. После этого для каждого набора параметров рассчитывался средний квадрат отклонения от экспериментальных данных по формуле

$$\delta\rho^2 = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\rho_{i-1}(T_i - T_n) - \rho_i(T_{i-1} - T_n) - \rho_n(T_i - T_{i-1})}{T_i - T_{i-1}}\right)^2, \tag{4}$$

где индекс n соответствует температуре и плотности на изобаре в экспериментальных точках (N — число точек), а индексы i и $i-1$ относятся к результатам расчетов по уравнению состояния (такие, что $T_{i-1} \leqslant T_n \leqslant T_i$). Интервал температур, в который попадают все N экспериментальных точек, делился на такое число I участков от T_{i-1} до T_i (здесь i меняется от 1 до I), что результат расчета $\delta\rho^2$ не зависел от I. В качестве оптимального набора параметров выбирался тот, который соответствовал наименьшему значению $\Delta\rho^2$.

По полученным уравнениям состояния рассчитаны ударные адиабаты образцов вольфрама с различной начальной плотностью. Результаты этих расчетов представлены в сравнении с имеющимися данными ударно-волновых экспериментов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 19-19-00713, https://rscf.ru/project/19-19-00713/.

1. А.А. Ликальтер, УФН **170**, 831 (2000).
2. Г.Г. Петрик, З.Р. Гаджиева, Мониторинг. Наука и технологии **1**(2), 67 (2010).

Интенсификация теплообмена в разделяющемся водном растворе олигомера и при вскипании воды

Д.В. Волосников*, И.И. Поволоцкий, П.В. Скрипов
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: dima_volosnikov@mail.ru

При повышении интенсивности процессов и одновременном уменьшении размеров теплопередающих устройств, ключевая задача, стоящая перед инженерной теплофизикой, состоит в надежном отведении тепловых потоков большой плотности до 10 МВт/м^2 [1]. Важным направлением служит поиск новых жидких теплоносителей адаптированных под широкие изменения тепловой нагрузки, включая импульсные воздействия.

Важной задачей является поиск средств охлаждения миниатюрных устройств с локальным тепловыделением [2]. Она решается, в частности, интегрированием систем микроканалов с циркуляцией жидкого теплоносителя. Обычно используют воду или водный раствор с незамерзающим компонентом. В этом случае эффективность охлаждения будет определяться теплофизическими свойствами рабочего тела и параметрами фазового перехода жидкость-пар. Сравнительно новый подход ориентирован на применение бинарных жидких теплоносителей, претерпевающих фазовый переход жидкость-жидкость (с поглощением тепла) без интенсивного испарения или кипения. Благодаря этому, исключается запаривание микроканалов, образование сухих пятен на теплопередающих стенках и их локальный перегрев. В этой связи, отметим перспективу водных растворов олигомеров, имеющих нижнюю критическую температуру растворения (НКТР). Превышение линии НКТР приводит к его разделению на две жидкие фазы. При углублении в область, лежащую выше диффузионной спинодали, разделение происходит преимущественно по механизму спинодального распада с интенсивным поглощением теплоты.

Цель работы состояла в выяснении характерных черт теплоотдачи к импульсно перегретым растворам в сопоставлении с теплоотдачей, наблюдаемой в области устойчивых состояний раствора и в чистых компонентах, в том числе, на фоне фазового перехода жидкость-жидкость и спинодального распада.

Объектом исследования служил водный раствор полипропиленгликоля (PPG) со средней молекулярной массой $M_n \sim 2000$, CAS No. 25322-69-4. Применен вариант метода управляемого импульсного нагрева зонда, основанный на тепловой моде термостабилизации зонда при заданной температуре T_{st} [3]. Продолжительность стадии термостабилизации составляла от 20 до 100 мс, температура T_{st} пошагово повышалась от исходного значения T_0 вплоть до $673 - 773$ К. По первичным данным рассчитывались значения мгновенного коэффициента теплоотдачи к чистым компонентам и раствору. При определенной степени перегрева обнаружен пороговый по температуре эффект усиления теплопереноса, до $2 - 3$ раз, связанный с распадом неустойчивого состояния раствора. Сопоставлены значения коэффициента теплоотдачи к импульсно разделяющемуся водному раствору PPG-2000 и соответствующие значения при вскипании воды в сходных условиях нагрева. Определены условия для применения разделяющегося раствора в качестве теплоносителя в процессах с мощным локальным тепловыделением и малого времени нагрева.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-19-00115-П.

1. M.A. Lexin, V.V. Yagov, A.R. Zabirov *et al.*, High Temperature **58**, 3 (2020).
2. W. Xing, A. Ullmann, N. Brauner *et al.*, Scientific Reports **8** (2018).
3. Д.В. Волосников, И.И. Поволоцкий, А.А. Старостин, П.В. Скрипов, ТВТ **59**, 3 (2021).

Настройка рабочей точки интерферометра Фабри-Перо в установке импульсного лазерного нагрева твердых тел при низких температурах

А.Н. Котов[1]*, А.А. Старостин[1], В.В. Шангин[1], С.Б. Бобин[2]

[1]Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: artem625@mail.ru

Результаты исследования твердых материалов в широком температурном диапазоне (10-300) К по методу накачка-зондирование [1], показали, что для достижения высоких уровней чувствительности сигнала отражения к импульсному воздействию, необходимо уделять особое внимание настройке режимов работы интерферометра Фабри-Перо.

Взаимное расположение торца световода и образца по методу [1] образует резонатор Фабри-Перо. В такой конструкции детектируемый оптический сигнал чувствителен к изменению оптического зазора и общего коэффициента отражения. Изменение сигнала на полный период происходит при изменении оптического зазора на 1.5 мкм (длина волны зондирующего излучения). Это определяет высокую восприимчивость оптической схемы к малым механическим перемещениям. Тепловые деформации при изменении температуры образца, фоновый вибрационный шум вносят искажения в полезный сигнал, а также приводят к смещению рабочей точки интерферометра.

Для получения максимальной чувствительности необходимо предварительно настроить интерферометр на точку квазилинейного участка рабочей характеристики. Для этого используется электронный блок управления и конструкция экспериментальной ячейки, в которой исследуемый образец помещается на пьезоэлектрический актюатор. Регулировочный диапазон напряжения актюатора $0-3$ кВ, выбран таким образом, чтобы обеспечить механическое перемещение образца, относительно световода на 2.5 мкм, что соответствует изменению фазы рабочей характеристики интерферометра в 1.5 периода. Настройка интерферометра перед серией измерений проводится в автоматизированном режиме под управлением микроконтроллера, входящего в состав электронного блока управления. На установке, с применением системы настройки интерферометра, были получены серии экспериментальных кривых на образцах HgSe в температурном диапазоне $10-300$ К и магнитном поле до 12 Тл.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-00789.

1. A. A. Starostin, V. V. Shangin, A. T. Lonchakov, A. N. Kotov and S. B. Bobin, Annalen der Physik, **532**, 1900586 (2020).

Изучение фронта испарения перегретого н-пентана в стеклянном капилляре при помощи скоростной видеосъемки в двух взаимно перпендикулярных направлениях и быстродействующего датчика давления

Е.В. Липнягов*, М.А. Паршакова
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: e1_ru@e1.ru

В работе представлены экспериментальные данные по распространению фронта испарения, сформированного в результате спонтанного вскипания перегретого н-пентана в стеклянной трубке. Трубка с внутренним диаметром 5.6 мм ориентирована вертикально. Её верх запаян. Кинетика вскипания изучена методами непрерывного понижения давления p и измерения времен жизни перегретой жидкости [1]. Центральная часть трубки длиной 82.8 мм термостатирована в ячейке с теплоносителем ПМС-20 от проточного термостата Huber CC-208B с точностью 0.1°C. Нижняя и верхняя её часть находятся при комнатной температуре. Перегрев реализован путем понижения давления на термостатируемую жидкость от 2.00 до 0.10 МПа ниже давления насыщенных паров p_s в интервале температур $T = 85.0-137.3$°C с одновременной видеосъемкой процесса вскипания в двух проекциях при помощи скоростных видеокамер Fastvideo-250 (2185 к/с) и Sony DSC-RX0M2 (1000 к/с).

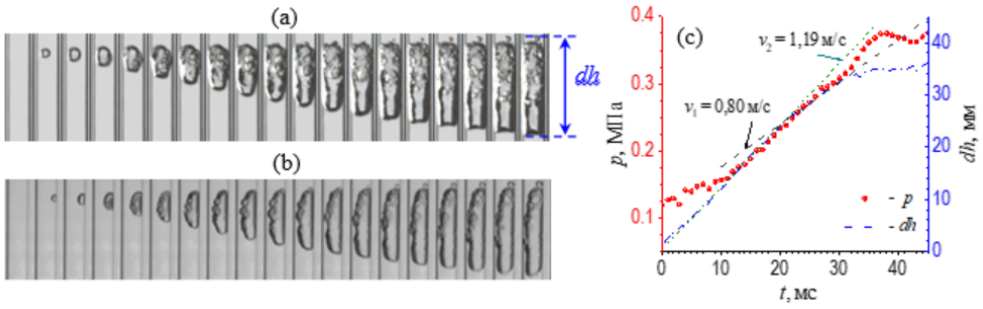


Рис. 1. Раскадровка начала вскипания перегретого *н*-пентана в стеклянной трубке при $p' = 0.10$ МПа, $T = 107.0$°C ($p_s = 0.69$ МПа), в двух проекциях (a, b) и зависимость разности высот dh от времени, синхронизированная с данными датчика давления Keller PAA-M5 (c): (a) — Fastvideo-250, $t_{bf} = 1.83$ мс; (b) — Sony DSC-RX0M2, $t_{bf} = 2.00$ мс. t_{bf} — время между кадрами.

Как и в работе [2], из всего массива видеоданных (более 3700) отобраны файлы, на которых вскипание перегретого *н*-пентана возникает на одном центре парообразования при разных температурах, а паровой пузырь при достижении противоположной стенки формирует две фазовых границы раздела (см. рис. 1). По выборочным кадрам скоростной видеосъемки данного процесса определены положения верхней и нижней границ раздела в момент времени t, рассчитаны разность этих величин dh и скорость распространения парового фронта $v = dh/dt = \text{const}$. Видеоданные синхронизированы с данными датчика давления Keller PAA-M5 с частотой измерения 1 кГц (см. рис. 1(c)). Из рис. 1 следует, что давление *н*-пентана слабо меняется в начале роста пузыря, а после формирования устойчивого фронта испарения пропорционально величине dh. Замедление роста величин p и dh связано с переходом в снарядно-пробковый режим двухфазного потока, отрывом пузыря (снаряда) от стенки и последующим его всплытием. Значения линейной скорости v составляют порядка 1 м/с и зависят от конфигурации межфазной поверхности жидкость-пар.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-08-00270).

1. Е.В. Липнягов, М.А. Паршакова, Известия РАН. Серия физическая **86** , 215 (2022)
2. Е.В. Липнягов, М.А. Паршакова, ТПТ **13** 561 (2021)

Изучение кинетики вскипания перегретого *н*-пентана в стеклянной трубке при помощи скоростной видеосъемки в двух взаимно перпендикулярных направлениях

М.А. Паршакова*, Е.В. Липнягов

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e–mail: parmari@yandex.ru

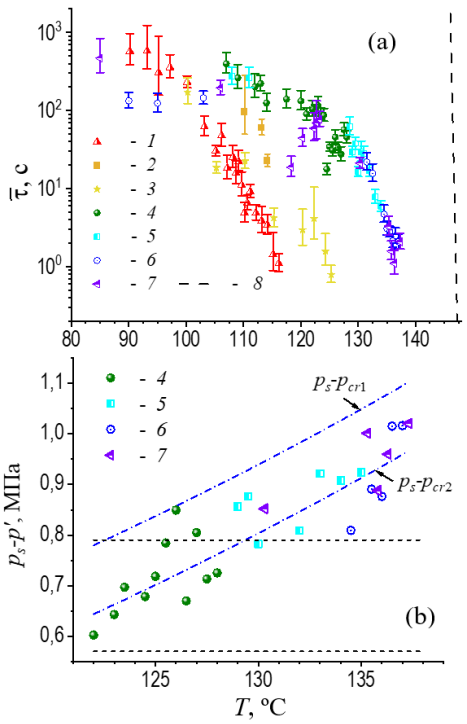


Рис. 1. Среднее время жизни при $p' = p_{at}$ (a) и средняя глубина захода в метастабильную область при $p' > p_{at}$ (b) перегретого *н*-пентана в зависимости от температуры: (1-3) — эксперимент с верхней частью трубки [1, 2]; (4-7) — эксперимент с серединой трубки; (8) — граница достижимого перегрева по теории гомогенной нуклеации. Трубка перезаполнялась *н*-пентаном только перед сериями (1), (3), (4) и (6).

В работе представлены экспериментальные данные по изучению кинетики спонтанного вскипания перегретого *н*-пентана в стеклянной трубке, ориентированной вертикально. Внутренний диаметр трубки $D = 5.6$ мм. Верхний её конец запаян. Часть трубки с *н*-пентаном помещена в ячейку с теплоносителем ПМС-20 от проточного термостата Huber CC-208B. Исследуемая жидкость вне ячейки находится при комнатной температуре. В серии опытов 1-3 (см. рис. 1) термостатирована верхняя часть трубки с запаянным концом (объем перегреваемой области $V = 2.8 \cdot 10^{-6} \cdot м^3$), в серии опытов 4-7 – её середина ($V = 2.0 \cdot 10^{-6} \cdot м^3$). Опыты проведены методами непрерывного понижения давления (в диапазоне температур $90.3 - 137.3°C$) и измерения времен жизни ($85.0 - 137.3°C$) [1, 2]. В первом случае измерялись температура T и давление p', при которых жидкость вскипает, во втором — температура и время жизни перегретой жидкости при установившемся атмосферном давлении $p_{at} = 0.10$ МПа. Одновременно велась скоростная видеосъемка процесса вскипания двумя скоростными видеокамерами (2185 и 1000 к/с) в двух взаимно перпендикулярных проекциях.

На рис. 1(a) представлена зависимость среднего времени жизни перегретого *н*-пентана от температуры при $p' = p_{at}$. Из него следует, что исключение двух видимых дефектов стекла, расположенных вблизи запаянного конца трубки, позволило повысить температуру достижимого перегрева на 12°C. На рис. 1(b) показана зависимость средней глубины захода в метастабильную область от температуры при $p' > p_{at}$. Как и ранее [2], максимальные значения $(p_s - p')$ ограничены либо постоянными значениями давления p', при которых сброс давления ускоряется ($p_{cr1} = e p_{at}$ и $p_{cr2} = \sqrt{e}\, p_{at}$), либо постоянными значениями $(p_s - p')$, где p_s — давление насыщенных паров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-08-00270).

1. S.A. Perminov, E.V. Lipnyagov, and M.A. Parshakova, J. Phys.: Conf. Ser. **2039**, 012027 (2021).

2. Е.В. Липнягов, М.А. Паршакова, Известия РАН. Серия физическая **86**, 221 (2022)

Методы управляемого импульсного нагрева для изучения свойств и тепловой проводимости многокомпонентных систем

И.И. Поволоцкий*, Д.В. Волосников, П.В. Скрипов
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: iliyapov@rambler.ru

Задача синтеза новых химических компонентов связана с терморегулированием и отводом тепловых потоков от стенок реактора и технологического оборудования. В процессах с многокомпонентными охлаждающими растворами и при резких изменениях тепловых нагрузок важно знать их фазовые диаграммы расслаивания и данные о тепловой проводимости, в том числе в импульсных процессах.

Цель данного исследования — развитие методик для определения фазовой диаграммы и сопоставления тепловой проводимости чистых компонентов и их растворов на основе быстродействующих теплофизических методов [1].

Тепловая проводимость определялась методом управляемого импульсного нагрева зонда в веществе (метод температурного плато. Фазовая диаграмма раствора определялась методом двухимпульсного нагрева. Зонд изготовлен из платиновой проволочки (диаметром 20 мкм) для термометрии. Он объединяет функции нагревателя и термометра сопротивления. В случае метода температурного плато для разогрева зонда используется комбинация двух импульсов тока: короткого (100 мкс) — разогревающего зонд от начальной температуры до заданной температуры T_{L} и длинного – термостабилизирующего (~ 10 мс). В случае метода двухимпульсного нагрева в первоначальный момент времени на зонд подается короткий, но мощный греющий импульс и температура зонда резко повышается за интервал времени порядка 100 мкс от начальной температуры T_0 до определенного значения T_{L}. Далее в нагреве следует «технологическая пауза». Зонд остывает. Затем включается измерительный импульс тока с меньшей амплитудой тока. Зонд постепенно вновь нагревается до той же температуры T_{L}. Оба метода позволяют создавать контролируемый перегрев в веществе и отслеживать отклик системы на импульсное тепловыделение зонда в исследуемом веществе. Методы позволяют осуществить заход в область перегретых состояний, т.е. за линию равновесия жидкость-пар, где перенос тепла чувствителен к малому изменению его состава.

В докладе будут продемонстрированы возможности двухимпульсного метода нагрева для определения фазовой диаграммы расслаивающихся растворов [2]. Метод температурного плато хорошо подходит для сопоставления тепловой проводимости различных жидких сред и изучения взаимосвязи избыточного объёма растворов с коэффициентом теплоотдачи [3].

Объектами исследования являлись трехкомпонентные растворы «непредельный углеводород — фторированный углеводород — фторированный углеводород» и их исходные компоненты.

Автор выражает благодарность Елиной Светлане Юрьевне за помощь в исследовательской работе.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-19-00115, https://rscf.ru/project/19-19-00115/.

1. Д.В. Волосников, И.И. Поволоцкий, А.А. Старостин, П.В. Скрипов, ТВТ **59**, 3 (2021)

2. D.V. Volosnikov, I.I. Povolotskiy J. Phys.: Conf. Ser. **1677** (2020).

3. Д.В. Волосников, И.И. Поволоцкий, П.В. Скрипов, ПЖТФ **47**, 22 (2021).

Расчет ударных адиабат сплавов вольфрам-никель-медь при высоких давлениях

Н.Н. Середкин[1,2,3*], К.В. Хищенко[1,3,4,5]

[1]Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия
[3]Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия
[4]Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
[5]Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия
*e–mail: nikser12@yandex.ru

Знание термодинамических свойств материалов представляет интерес для решения фундаментальных и прикладных задач физики конденсированного состояния. В этой работе проведены расчеты ударных адиабат сплавов вольфрам–никель–медь на основе принципа аддитивности ударных адиабат компонентов [1]. Согласно этому принципу объем ударно-сжатой смеси предполагается равным сумме объемов компонентов при ударном сжатии до того же самого давления по отдельности, что выражается следующим соотношением:

$$V_{1N}(P) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i V_i(P), \tag{1}$$

где P — давление; V_{1N} — удельный объем смеси; V_i — удельный объем i-того компонента; α_i — весовая концентрация i-того компонента; N — количество компонентов смеси. В частности, уравнение (1) позволяет найти адиабату неизвестного компонента по адиабатам смеси и остальных компонентов [1].

Проведено также сопоставление результатов расчетов ударных адиабат по принципу аддитивности с имеющимися данными ударно-волновых экспериментов для сплавов W(90)–Ni(6)–Cu(4) [2,3], W(90)–Ni(7.5)–Cu(2.5) [3], а также сплава ВНМ-3-2 [4]. Здесь в круглых скобках указаны массовые доли компонентов.

Полученные результаты для сплавов вольфрам–никель–медь находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 19-19-00713, https://rscf.ru/project/19-19-00713/.

1. Y.F. Alekseev, L.V. Al'tshuler, V.P. Krupnikova, J. Appl. Mech. Tech. Phys. **12**, 624 (1971).
2. W.H. Isbell, F.H. Shipman, A.H. Jones, Hugoniot equation of state measurements for eleven materials to five megabars. General Motors Corp., Mat. Sci. Lab. Report MSL-**68**-13 (1968).
3. M. van Thiel (Ed.), Compendium of Shock Wave Data. Report UCRL-50108 – Livermore: Lawrence Livermore Laboratory, (1977).
4. M.Yu. Belyakova, M.V. Zhernokletov, Yu.N. Sutulov, R.F. Trunin, Izv. Akad. Nauk SSSR, Fiz. Zemli **1**, 99 (1991).

Капиллярная постоянная раствора изобутан-водород

М.Н. Хотиенкова*, В.Н. Андбаева
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: mkhotienkova@yandex.ru

В данной работе представлены результаты экспериментального определения a^2 — капиллярной постоянной компонентов сжиженного природного газа — раствора изобутан–водород.

В опытах использовался дифференциальный вариант метода капиллярного поднятия [1]. Эксперименты проведены по четырём изотермам, в интервале температур 298.15 – 348.15 K, в диапазоне давлений от давления насыщения чистого изобутана до 4 МПа. Увеличение давления проводилось путём добавления порции водорода. Концентрации жидкой и паровой фаз раствора определялись по экспериментальным данным, представленным в работе [2]. Концентрация водорода в растворе не превышает 3.5 %. На рис. 1 представлена зависимость $a^2(p)$ раствора изобутан–водород.

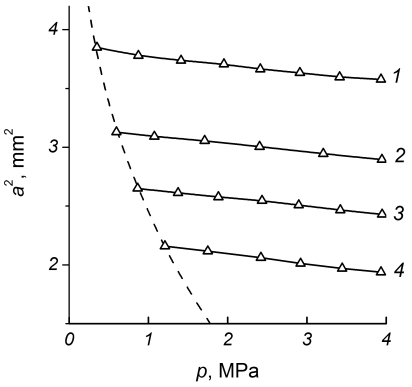


Рис. 1. Барическая зависимость капиллярной постоянной раствора изобутан–водород при температурах: 1 — $T = 298.15$, 2 — 318.15, 3 — 333.15, 4 — 348.15 K. Штриховая линия — капиллярная постоянная чистого изобутана.

Видно, что добавление водорода в изобутан, как и увеличение температуры, приводит к понижению капиллярной постоянной раствора. В исследованном диапазоне параметров состояния капиллярная постоянная раствора является линейной функцией давления и может быть описана уравнением вида: $a^2 = a_0^2 + A(\pi - \pi_s)$, где a_0^2 — капиллярная постоянная чистого изобутана, $\pi = p/p_c$, $\pi_s = p_s/p_c$, p_s и p_c — давление насыщения и давление в критической точке i — C_4H_{10} соответственно. Функция $A = f(T)$ получена методом регрессионного анализа.

Для капиллярной постоянной изобутана получено уравнение: $a_0^2 = \alpha_1\varepsilon^\mu(1 + \alpha_2\varepsilon + \alpha_3\varepsilon^{12})$, где $\varepsilon = 1 - T/T_c$.

Водород в изобутане выступает как поверхностно активная добавка, которая уменьшает поверхностное натяжение растворителя. Аналогичное влияние наблюдается в исследованных нами растворах: метан–водород, *н*-бутан–водород, пропан–водород, этан–водород.

1. В.Г. Байдаков, Межфазная граница простых классических и квантовых жидкостей. — Е.: УИФ «Наука» (1994).

2. M.R. Dean, J.W. Tooke, J. Ind. Eng. Chem. **38**, 4 (1946).

Вторичное измельчение капель мазута и водомазутной композиции при соударениях между собой и с твердой стенкой

Н.Е. Шлегель*, П.А. Стрижак

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

*e–mail: nes6@tpu.ru

В настоящие время для теплоснабжения населения и промышленных предприятий используются как традиционные виды топлива (уголь, газ) так и нефтепродукты (мазут, дизтопливо, сырая нефть) [1]. Мазут представляет собой смесь фракционного сырья и остатков процессов очистки и крекинга нефти и содержит высокий процент дизельного топлива (около 40%). По данным Росстата 84.7% мазутного топливо используется на теплоэнергетических объектах, которые работают на нефтепродуктах, а именно количество объектов в теплоэнергетике, использующих мазут как основной вид топлива составляет 2357 – котельных и 7 — ТЭЦ. В связи с низкой стоимости и высокой теплотворной способности мазут является актуальным топливом во многих промышленностях. По оценкам NASA, США сможет получать ежегодную экономию в размере 1.6 миллиарда долларов, если удастся повысить эффективность сгорания капель мазута хотя бы на 2% [2]. Повысить эффективность сжигания такого топлива можно путем снижения размеров капель, что приведет к полноте выгорания топлива и снижению временных характеристик горения.

Цель настоящего исследования — определение критических условий и характеристик вторичного измельчения капель мазута и водо-мазутной композиции при соударении их с твердой стенкой.

Экспериментальные исследования проводились на аналогичном стенде и методики используемой в ранней работе [3]. Анализ полученной по результатам опытов карты режимов (Рис. 1) показал, что измельчение обводнённого мазута происходит при критическом числе Вебера более 150. Дробление же капель мазута, соударяющихся с каплями воды, происходит при критическом числе Вебера около 50. Следует отметить, что отношение свободных площадей поверхности после и до взаимодействия меняется существенно при числе Вебера более 100. Наибольшее количество вторичных фрагментов образовывалось при соударении капель мазута с водой. Сравнивая же отношение S1/S0, определено, что при числе Вебера около 200 капли двух компонентного топлива измельчаются эффективнее на 50% относительно мазутного топлива, а соударяющиеся капли мазута с водой практически на 100%.

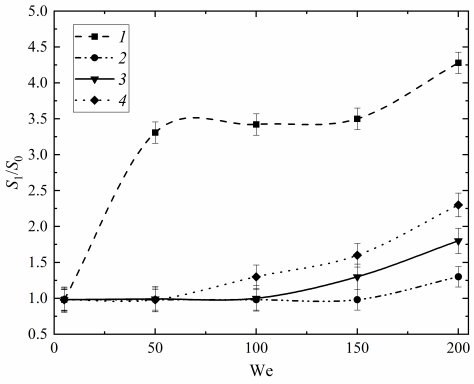


Рис. 1. Отношение площадей свободной поверхности жидкости после и до взаимодействия капель: 1 — вода; 2 — мазут; 3 — двухкомпонентное топливо (мазут 90 масс.%, вода 10 масс.%); 4 — соударение капель мазута и воды.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 22-79-00197 (https://rscf.ru/project/22-79-00197/).

1. S.V. Alekseenko *et al.*, Bull. Tomsk Polytech. Univ. Geo Assets Eng. **328**, 12 (2017).

2. R. Ocampo-Barrera *et al.*, Combust. Flame. **126**, 4 (2001).

3. A.G. Islamova *et al.*, Powder Technol. **403**, (2022).

Электрофизика

Создание модельных индукторных систем на основе образцов нанокомпозита медь-ниобий, полученных магнитно-импульсным прессованием порошков

С.В. Заяц*, А.В. Спирин, С.Н. Паранин
Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: seriyoga@iep.uran.ru

При генерации импульсных сильных магнитных полей (СМП) основной проблемой является деградация и разрушение проводящих материалов в условиях совместного силового и термического воздействия тока и магнитного поля. Актуальной остается проблема стойкости материалов, применяемых для систем многократной генерации импульсов СМП микросекундного диапазона длительности (5 — 100 мкс). Такие поля предпочтительны в технологиях магнитно-импульсной обработки (МИО) металлов: штамповке, сварке, резке, сборочных операциях и др., где основным инструментом является индуктор в виде одно- или многовитковой катушки. Низкая прочность и термическая стойкость индукторных систем на основе меди и алюминия является серьезной причиной, сдерживающей широкое использование технологий МИО в производстве. Интерес вызывает волокнистый нанокомпозит Cu-Nb с высокими значениями проводимости, сопротивлением разрыву и термостойкостью. В качестве исходного материала в данной работе был выбран микропровод Cu-18%Nb круглого сечения компании ООО «НПП «Наноэлектро» (г. Москва).

Помол фрагментов коммерческого микрокомпозиционного провода Cu-18%Nb диаметром 0.15 — 0.18 мм (сечки) проводился в шаровой планетарной мельнице АГО-2С. Помол проводился в два этапа: сухой помол в среде аргона для макроскопической деформации сечки в течение 15 — 30 мин. и помол в бензине для предотвращения сварки частиц с просеиванием на сите 20 — 64 мкм после 30 мин. помола. Дополнительный отжиг порошка в вакууме при 500°C/1 ч позволил улучшить качество поверхности частиц, прессуемость, а также минимизировать содержание окиси меди в спеченных материалах. Также в работе использовался нанопорошок Cu-25%Nb, полученный в ИПФМ СО РАН (Томск) методом синхронного электровзрыва проволок (ЭВП).

Одноосное магнитно-импульсное прессование (МИП) всех порошков проводилось при давлении порядка 1.3 ГПа с нагревом до 430°C в вакууме. Диаметр компактов: 8, 15 и 32 мм, толщина: 2.5 — 8 мм. Относительная плотность образцов после МИП составила: сечка (99 — 99.4%), молотый порошок (96 — 98.2%), ЭВП-нанопорошок (97%). Отжиг/спекание образцов производили в вакууме при температуре от 500 до 850°C в течение 1 часа, увеличение относительной плотности при спекании образцов не превышало 1.5%.

Микротвердость образцов по Виккерсу, 2.9—3.7 ГПа, оказалась выше, чем у материала провода. Закономерностей в изменении упругого модуля в результате отжига не выявлено, его значение варьируется в диапазоне 105 — 140 ГПа для всех материалов. Прочность на разрыв после отжига при 850°C/1 ч составила 760—810 МПа, что составляет 70% от прочности шины без предварительного отжига. Электросопротивление достигало уровня 5.3 — 5.5 мкОм·см. При этом сопротивление образцов после спекания при 800°C сопоставимо с сопротивлением алюминиевых сплавов.

По итогам испытаний образцы в полях амплитудой 40 и 50 Тл показали меньшую стойкость к деградации и разрушению, чем коммерческая шина, однако использование порошковой технологии позволяет изготовить индукторы для формования деталей малых размеров и сложной формы. Образцы из молотых порошков и ЭВП-нанопорошка характеризуются близкими ресурсными показателями и могут быть использованы в качестве элементов индукторных систем в полях до 35 Тл длительностью в десятки микросекунд.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ 20-58-00029-Бел_а.

Исследование электрофизических свойств пыли сталеплавильных дуговых печей при карботермическом восстановлении

А.П. Анзулевич[1], Л.Ю. Коваленко[1], Д.А. Павлов[1], Д.А. Калганов[2]*

[1]Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
[2]Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
*e–mail: kalganov@itmo.ru

Повышение качества извлекаемых побочных продуктов и минимизация энергозатрат на обработку являются основными условиями их повторного использования. Ранее показана высокая эффективность использования микроволнового нагрева как для измельчения руды [1], так и для предварительной обработки (восстановления) различных видов отходов [2], включающих пыль сталеплавильных печей [3]. Основной проблемой применения электромагнитных волн в металлургической промышленности является их малая глубина проникновения в материал с высокой электропроводностью. Условия для равномерного объемного нагрева могут быть созданы изменением характеристик электромагнитного поля, либо самого обрабатываемого материала. При этом возможно согласование поверхностного импеданса за счёт магнитных свойств компонентов [3]. Электрофизические свойства претерпевают значительные изменения, описание которых для сложной многофазной системы без использования экспериментальных данных невозможно. В данной работе исследованы электрофизические свойства пыли сталеплавильных дуговых печей с восстановителем (биоуголь) и связующим (бентонит). При помощи резонаторного метода на частоте 2.45 ГГц получена температурная зависимость диэлектрической проницаемости и тангенса диэлектрических потерь — рис. 1(a). Также, в волноводе сечением 95×45 мм^2 исследовано поглощение электромагнитных волн при нагреве до 600°C — рис. 1(b).

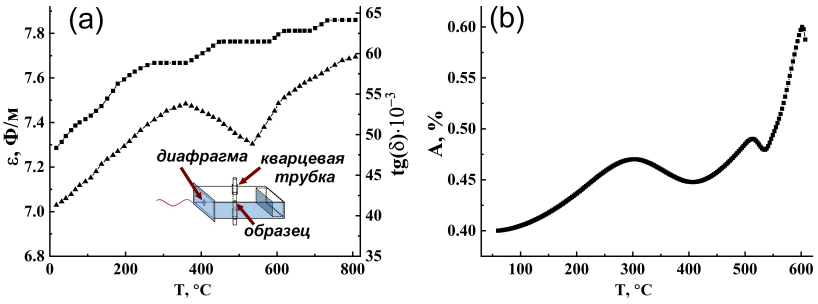


Рис. 1. Электрофизические свойства исследуемой смеси. (a) — диэлектрическая проницаемость и тангенс диэлектрических потерь (схема измерений во вставке); (b) — поглощение электромагнитных волн при карботермическом восстановлении.

Учёт полученных данных необходим при расчёте оптимального способа подготовки материала и микроволнового нагрева при карботермическом восстановлении металлов из пыли сталеплавильных дуговых печей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Государственного фонда естественных наук Китая в рамках научного проекта № 21-58-53044.

1. D.A. Jones, S.W. Kingman, D.N. Whittles, I.S. Lowndes, Miner. Eng. **18**, 659 (2005).
2. Z. Peng, J.Y. Hwang, Int. Mater. Rev. **60**, 30 (2015).
3. M. Omran, T. Fabritius, Powder Technol. **308**, 47 (2017).

Исследование поведения композитного материала на основе наноструктурного сплава Cu-Nb в условиях генерации сильных импульсных магнитных полей

В.И. Крутиков*, С.Н. Паранин, А.В. Спирин, Е.Ю. Зайцев

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: krutikov@iep.uran.ru

Технологии магнитно-импульсной обработки материалов применяют в изготовлении и соединении деталей в таких отраслях промышленности, как автомобилестроение [1], авиастроение [2] и атомная энергетика [3]. Основные узлы магнитно-импульсной установки включают накопитель энергии, коммутирующее устройство и индуктор. Последний работает в наиболее напряжённых условиях, что сказывается на его возможностях и ресурсе, поэтому остается актуальной работа как над совершенствованием конструкции индукторов, так и над созданием для них новых материалов. В качестве материалов индукторов перспективны так называемые «суперпровода» или композитные материалы, сочетающие в себе проводимость на уровне 50% от проводимости меди и прочность на разрыв, сравнимую с таковой у конструкционной стали. В данной работе был использован такой материал из сплава Cu-Nb в виде шины прямоугольного сечения 2×8 мм^2 производства ООО «НПП «Наноэлектро» (Москва) [4].

Целью работы было создание экспериментального индуктора магнитного поля, содержащего образцы из медь-ниобиевого сплава и композитных материалов на его основе и испытания индуктора с этими образцами в сильных импульсных магнитных полях.

Были проведены сравнительные испытания коммерческой шины из волокнистого нанокомпозита Cu-18%Nb, однослойных структур на основе базового порошка Cu-Nb и двухслойной структуры на основе этого базового порошка с добавлением 15% TiC в условиях генерации импульсных магнитных полей амплитудой 40 и 50 Тл длительностью полупериода около 15 мкс.

Показано, что все образцы выдерживают без разрушения более 100 импульсов магнитного поля амплитудой 40 Тл. В процессе обработки магнитным полем этой амплитуды у шины и компактов характерным образом изменяется рельеф поверхности: у шины становятся видны прожилки медно-ниобиевого композита и медная связка, а у компактов — зерна, напоминающие частицы порошка, из которого они спрессованы. Коммерческая шина выдержала 120 импульсов поля амплитудой 40 Тл без трещин. На компактах трещины и разрезы перпендикулярно направлению тока (эффект пилы), возникли после 10, 80 и 120 импульсов сильного поля соответственно у двухслойного образца, однослойного спечённого при 850°C и однослойного спечённого при 800°C.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 20-21-00050 в части приобретения материалов и при частичной поддержке РНФ в рамках проекта № 22-79-00307 (https://rscf.ru/project/22-79-00307/) в части разработки индукторов.

1. R.M. Miranda et al., Soldag. Inspeção, **19**, 69 (2014).
2. C. Sow et al., AIP Conference Proceedings, **1960**, 100016 (2018).
3. J. McGinley, Proceedings of the 17th International Conference on Nuclear Engineering ICONE17 July 12-16, 2009, Brussels, Belgium. ASME **1**, 627 (2010).
4. ООО «НПП» Наноэлектро» [Электронный ресурс]: офиц. сайт. компании. Москва, Россия. URL: http://www.naelco.ru (дата обращения: 20.03.2020).

Диффузия сильных магнитных полей в хрупкий цилиндрический проводник

П.А. Русских

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e–mail: russkikh_p@inbox.ru

Диффузия магнитных полей активно изучается с начала предыдущего века. Она имеет множество применений: электромагнитное ускорение твёрдых тел, передача электромагнитной энергии по вакуумным передающим линиям, сжатие металлических трубок при помощи одновитковых соленоидов (индукторов). Главной проблемой последних является низкая стойкость, поскольку индукторы эксплуатируются в очень напряжённых условиях. Сильные магнитные поля амплитудой 50 Тл и длительностью полуволны $5 - 20$ мкс вызывают сильный нагрев поверхности, термомеханические напряжения, деформации и в конечном счёте приводят к разрушению. Возможное решение было предложено в [1], где автором без учёта тепловых эффектов было показано, что в материале с сопротивлением, спадающим по экспоненциальному закону, омический нагрев значительно снижается. Целью текущей работы является подробное изучение того, как профиль градиентного сопротивления материала влияет на стойкость материала индуктора.

Моделирование было выполнено для бесконечного полого цилиндрического проводника. Согласовано решались соответствующие уравнения магнитной диффузии и теплопроводности. Механическая система уравнений описывалась законом Гука. Температурные зависимости сопротивления и предела прочности были аппроксимированы линейными функциями. Пространственная зависимость сопротивления задавалась в качестве трёхпараметрической функции. Первый параметр определял отношение удельного сопротивления на поверхности и в объёме материала, второй — глубину модифицированного слоя и третий — резкость профиля, определяя, насколько форма профиля близка к экспоненциальной или ступенчатой. Другие параметры материала подразумевались постоянными. Магнитное поле на внутренней границе образца задавалось в виде затухающей синусоиды. Наибольшая амплитуда магнитного поля на внутренней границе B_{th}, которая ещё не приводит к возникновению пластических деформаций, согласно условию пластичности Мизеса была выбрана в качестве критерия для оценки стойкости индуктора в сильном импульсном магнитном поле.

Моделирование показало, что при одной и той же форме магнитного импульса материал с меньшим внутренним радиусом будет иметь более низкое пороговое поле B_{th}, поскольку плотность тока и омический нагрев концентрируются на внутренней поверхности проводника. Также было изучено влияние основных параметров материала на пороговое поле. Температура возникновения пластической деформации в материале была получена аналитически. Были проанализированы различные формы профиля поверхностной модификации и составлены рекомендации по созданию оптимального профиля в проводниках. Высокорезистивный поверхностный слой с сопротивлением в 2.5 раза превышающим сопротивление объёма материала может увеличить пороговое поле на 25%.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта РФФИ № 20-21-00050.

1. Г.А. Шнеерсон, Поля и переходные процессы в аппаратуре сверхсильных токов. — М.: Энергоиздат (1981).

Наноматериалы

Монослой C_2N как перспективный материал для хранения водорода: DFT моделирование

К.В. Алантьев, Е.В. Аникина*
Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия
*e–mail: anikinaev@susu.ru

Низкоразмерные углеродные структуры, обладающие высокой удельной поверхностью и низкой плотностью, являются многообещающими кандидатами на роль материалов для безопасного и эффективного хранения водородного топлива. Недавно синтезированный монослой нитрированного графена [1] привлек внимание исследователей в области водородных хранилищ благодаря свой сложной пористой структуре. Для оценки перспективности этого материала мы смоделировали сорбцию водорода на нем с использованием программного пакета SIESTA [2].

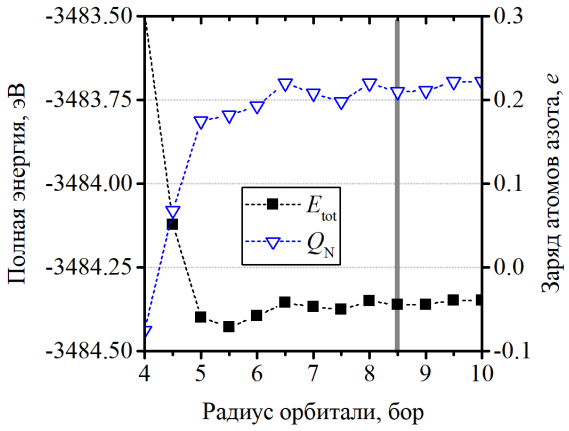


Рис. 1. Зависимость полной энергии системы и заряда атомов азота от радиуса обрезки N^{2p} орбитали (1 бор ≈ 0.529 Å)

Гексагональная ячейка моделирования C_2N содержала 18 атомов (12 атомов углерода и 6 атомов азота). Расчеты проводились в приближении локальной электронной плотности. В не периодичном направлении (перпендикулярном монослою) было взято не менее 30 Å вакуума. Параметр трансляции составил 8.26 Å. Для всех элементов (H, C, N) была проведена оптимизация параметров базисных наборов. Пример такой оптимизации для N^{2p} орбитали приведен на рис. 1. Оптимальный радиус обрезки орбитали выбирался по достижению минимальных колебаний физических параметров (полной энергии и заряда), он отмечен на графике серой линией. С разбиением обратного пространства на $7\times7\times1$ k-точек и параметром разбиения прямого пространства MeshCutoff 230 Рб точность вычисления полной энергии системы составила ~ 5 мэВ.

На чистый монослой добавлялись разные конфигурации молекулы водорода. После оптимизации геометрии системы (параметр сходимости силы составлял $2.5\cdot10^{-4}$ Рб/бор $\approx$ 1.3 мэВ/Å) наиболее устойчивым оказалось положение молекулы H_2 в большой поре C_2N, образованной атомами азота. Энергия связи водорода считалась по формуле $E_{\text{bind}} = E_{C_2N+H_2} - E_{C_2N} - E_{H_2} + E_{\text{BSSE}}$, где $E_{C_2N+H_2}$ — полная энергия монослоя с молекулой водорода, E_{C_2N}/E_{H_2} — полная энергия изолированного монослоя/молекулы H_2, E_{BSSE} — поправка Бойса-Бернарди к ошибке суперпозиции базисного набора [3].

Для наиболее устойчивой конфигурации H_2 E_{bind} составила 154 мэВ, что не попадает в желаемый интервал значений (200 – 600 мэВ/молекула H_2), который позволит осуществлять эффективные циклы сорбции/десорбции водорода. Таким образом, чистый монослой C_2N не подходит для хранения водорода, а для усиления связи водорода со структурой необходимо создать более активные центры сорбции, например, легируя материал атомами легких металлов.

1. J. Mahmood *et al.*, Nat. Commun. **6**, 6486 (2015).
2. J.M. Soler *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **14**, 2745 (2002).
3. S.F. Boys, F. Bernardi, Mol. Phys. **100**, 65 (2002).

Применение сканирующей туннельной микроскопии для исследования низкоразмерных и слоистых систем

Д.В. Беляев*, Т.В. Кузнецова

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: danil.belyaev08@gmail.com

Наноматериалы и низкоразмерные системы в последнее время получили огромное практическое распространение за счет своих уникальных свойств, а также открыли возможности для исследования новых физических явлений, характерных только для данных систем. Одной из причин этого является появление технических средств, позволяющих исследовать свойства подобных структур, одним из которых является сканирующий туннельный микроскоп (СТМ). В работе рассмотрены на примерах наших исследований и литературных данных, возможности применения сверхвысоковакуумной сканирующей туннельной микроскопии для изучения электронной и атомной структуры поверхности перспективных низкоразмерных халькогенидных слоистых систем.

Работа СТМ основана на протекании туннельного тока между зондом (иглой) и проводящим образцом. Высокое разрешение обусловлено экспоненциальной зависимостью туннельного тока от расстояния между зондом и образцом. СТМ позволяет получить информацию о морфологии и электронной структуре поверхности исследуемого образца в режиме реального времени с разрешением вплоть до атомарного. Так в работе [1] с помощью СТМ были изучены дефекты и структурные неоднородности в полупроводнике BiTeI, которые показаны на рис. 1. Дефекты структуры в данном материале и подобных ему влияют на их свойства и поэтому требуют детального изучения для применения в реальных устройствах. В работе [2] методом СТМ была исследована тонкая пленка $MnBi_2Se_4$, которая является антиферромагнитным топологическим изолятором. По результатам исследования было выяснено, что поверхность такого материала преимущественно оканчивается слоем Se с гексагональной структурой, а также выявлены различные типы дефектов поверхности пленки. В работе [3] с помощью СТМ была исследована атомная структура дихалькогенида $1T$-$TiSe_2$, выявлены структурные дефекты поверхности, которые связаны со структурной перестройкой слоев, сопровождающейся сменой октаэдрической координации атомов титана на призматическую. В данной работе с помощью СТМ была исследована морфология поверхности топологического изолятора $Bi_{1.1}Sb_{0.9}Te_2S$. Это демонстрирует, что сканирующая туннельная микроскопия позволяет исследовать низкоразмерные и слоистые системы с атомарным разрешением.

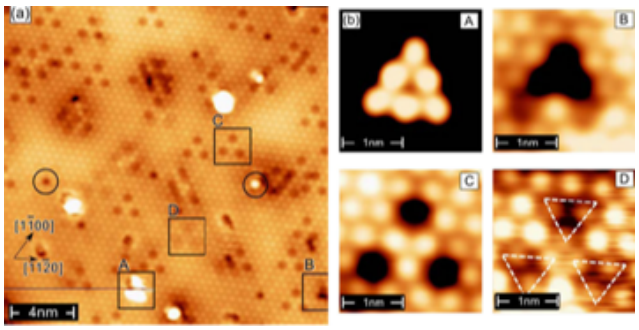


Рис. 1. Изображение поверхности BiTeI(0001), оканчивающейся атомами I, полученное на СТМ при $T = 5$ K. Четыре различных типа дефектов обозначены A, B, C и D [1].

1. S. Fiedler *et al.*, New Journal of Physics **16**, 075013 (2014).

2. R.C. Walko *et al.*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **143**, 115391 (2022).

3. А.С. Разинкин *и др.*, Журнал Структурной Химии **51**, 765 (2010).

Синтез и магнитные свойства нанопроводов 3d-переходных металлов в тонкопленочной матрице оксида алюминия

А.А. Верясова[1]*, А.Е. Дрягина[1], А.Н. Горьковенко[1], Н.А. Кулеш[1], В.О. Васьковский[1,2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: alenaver75@gmail.com

Магнитные нанопровода относятся к перспективному классу магнитных наноматериалов, представляющих интерес для целого ряда областей применения: среды для записи информации, сенсоры, устройства спинтроники и т.д. [1]. У нанопроводов, синтезированных с использованием шаблонов анодированного алюминия, есть возможность модуляции длины, диаметра, а также состава.

Работа направлена на получение и анализ магнитных свойств металлических нанопроводов Co, Fe, Ni в тонкопленочном слое анодированного алюминия с использованием электроосаждения в режиме переменного (AC-режиме) и постоянного (DC-режиме) тока.

В качестве основы выступали тонкие пленки высокочистого Al толщиной 2 мкм, полученные методом ионного распыления. Анодирование слоя алюминия проводилось в растворе щавелевой кислоты [2]. После получения шаблонов проводилось электролитическое осаждение в них чистых металлов и сплавов Ni, Co, Fe в двух режимах: в AC-режиме и DC-режиме. В результате диаметр нанопроводов составлял около 50 нм.

Образцы были проанализированы с целью уточнения морфологии (сканирующая электронная микроскопия), состава (рентгенофлуоресцентный анализ) и анализа магнитных гистерезисных свойств. В качестве примера, на рис. 1 приведены петли гистерезиса, измеренные на массивах магнитных нанопроводов, полученных в разных режимах электроосаждения. Для всех полученных в AC-режиме образцов наблюдалась сильная одноосная магнитная анизотропия и высокое значение коэрцитивной силы. Большинство образцов, синтезированных в режиме DC демонстрировали слабую магнитную анизотропию, что было обусловлено особенностями технологии растворения барьерного слоя Al_2O_3 и морфологией осажденного магнитного материала.

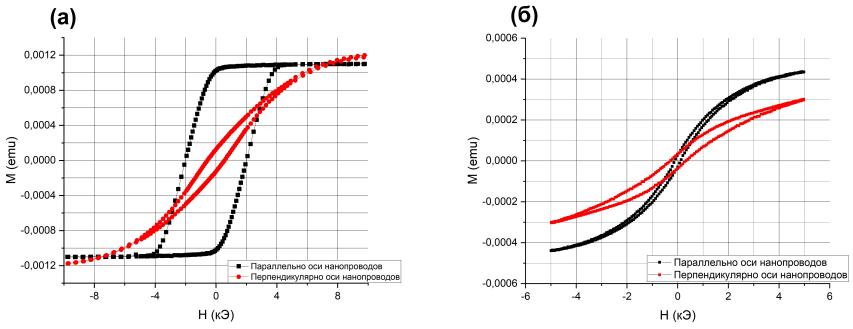


Рис. 1. Петли гистерезиса, измеренных в направлении вдоль (черная линия и точки) или перпендикулярно (красная линия и точки) оси нанопроводов Co для образцов, полученных с использованием электроосаждения в режиме переменного тока (а) и постоянного тока (б).

1. Lee W., Park S.J., Chemical reviews **114**, 7487 (2014).
2. Dryagina A. *et al.*, IEEE Magnetics Letters **13**, 1 (2022).

Синтез и магнитные свойства нанокомпозиционных материалов на основе металлических нанопроводов в полимерной матрице

А.Е. Дрягина[1]*, Е.В. Кудюков[1], А.Н. Горьковенко[1], Н.А. Кулеш[1], В.О. Васьковский[1,2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: dryagina.nastya@list.ru

Нанокомпозиционные материалы представляют большой интерес в различных областях науки и техники. В качестве основы нанокомпозиционных материалов могут выступать различные полимеры и гели, в качестве наполнителей — наночастицы, нанопровода и др. [1] В настоящей работе в качестве основы композита выбран поливинилиденфторид (ПВДФ), что обусловлено значительной практической важностью, поскольку сочетание высоких сегнетоэлектрических свойств ПВДФ и магнитострикции нанопроводов позволяет рассматривать их как перспективные материалы с высоким магнитоэлектрическим эффектом. Наполнителем выступают нанопровода на основе 3d-переходных металлов, которые были изготовлены методом электроосаждения. В качестве основы для нанопроводов выступали пористые шаблоны, полученные методом анодирования в растворе щавелевой кислоты [2].

Создание нанокомпозиционного материала состояло из двух этапов: синтез наполнителя, то есть нанопроводов и перенос нанопроводов в полимер. В дальнейшем синтезировались полимерные плёнки с изотропно распределенными нанопроводами и упорядоченными во внешнем магнитном поле разными способами.

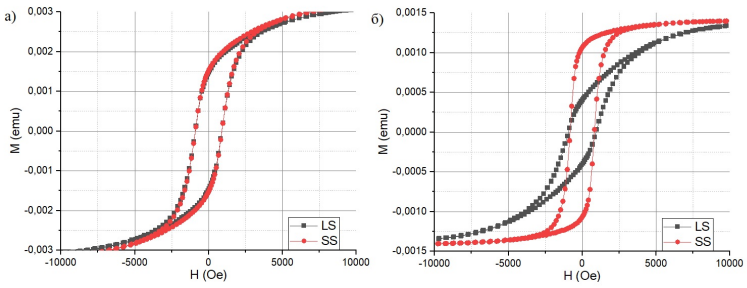


Рис. 1. Петли гистерезиса, полученные на композитах с (а) неупорядоченными нанопроводами и (б) упорядоченными нанопроводами в магнитном поле вдоль (красная) и перпендикулярно (серая) приложенному внешнему магнитному полю.

Для неупорядоченного образца наблюдается почти полное совпадение петель гистерезиса (рис. 1 (а)), измеренных в плоскости образца вдоль произвольного и перпендикулярного ему направлений, что подтверждает отсутствие наведенной магнитной анизотропии. Для упорядоченного образца видна значительная разница между петлями гистерезиса, измеренными вдоль различных направлений по отношению к полю упорядочения как показано на рис. 1 (б).

В рамках данной работы были синтезированы нанопровода и на их основе получены нанокомпозиты, упорядоченные и неупорядоченные во внешнем магнитном поле. Показано, что при использовании внешнего магнитного поля величиной 1.5 кЭ возможно упорядочение нанопроводов, тогда как в отсутствии магнитного поля образцы получаются изотропными.

1. Kausar A., Journal of Plastic Film & Sheeting **35**, (2019).
2. Dryagina A. *et al.*, IEEE Magnetics Letters **13**, 1 (2022).

Электронное строение и оптические свойства систем $C_{60}(CF_3)_{10}$ и $C_{70}(CF_3)_{10}$ с учетом внутриузельного кулоновского взаимодействия π-электронов

А.И. Мурзашев, А.П. Жуманазаров*

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия
*e–mail: allayar_0909@mail.ru

Интерес к созданию новой элементной базы для электроники интенсифицирует исследования в области наночастиц. Эти системы интересны тем, что их электронные и оптические свойства могут существенным образом изменены в зависимости, как от их состава, так и от характера распределения в них атомов и молекулярных комплексов внедренных в них.

В последнее время особый интерес вызывают соединения на основе фуллеренов и атомов группы галогенов или молекулярных комплексов, являющихся акцепторами электронов. Это обусловлено тем, что внедрение таких систем существенным образом перестраивает их электронное строение. Если в фуллеренах углерод находится в sp^2 гибридизированном состоянии, то в соединениях на их основе в фуллереновом каркасе появляются атомы углерода в sp^3 гибридизированном состоянии, что существенно меняет электронные свойства системы, которые кроме того существенным образом зависят и от характера распределения таких систем по каркасу системы.

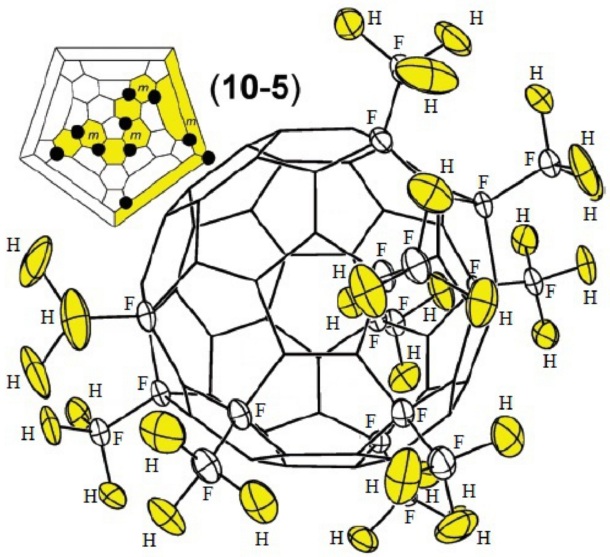


Рис. 1. Схематическое изомера 10-5 соединения $C_{60}(CF_3)_{10}$.

В настоящей работе в рамках модели Хаббарда, в Приближении статических флуктуаций (ПСФ) вычислены энергетические спектры пяти соединений $C_{60}(CF_3)_{10}$ и пяти $C_{70}(CF_3)_{10}$, представляющих собой фуллерены, в каркасе которых размещены триметилфторидные комплексы CF_3. Эти расчеты были инициированы результатами работ [1,2], где были синтезированы соединения $C_{60}(CF_3)_{10}$ и $C_{70}(CF_3)_{10}$, в этих работах были получены пять соединений (изомеров) $C_{60}(CF_3)_{10}$ и пять изомеров $C_{70}(CF_3)_{10}$, отличающихся друг от друга разным характером распределения комплексов CF_3 по каркасу фуллеренов. Измеренные спектры оптического поглощения (СОП) разных изомеров показали, что их электронные свойства существенно отличаются друг от друга. исходя из этого, в настоящей работе на основе полученных энергетических спектров нами были получены СОП, каждого указанного выше изомера. Сравнение полученных СОП с СОП, измеренными в [1,2], показало хорошее качественное согласие экспериментальных и теоретических кривых, что говорит об адекватности, выбранной модели методов расчета, подробно описанных в [3,4].

1. A.A. Popov, I.E. Kareev, N.B. Shustova *et al.* J. Am. Chem. Sos. **129**, 11551 (2007).

2. A.A. Popov, I.E. Kareev, N.B. Shustova *et al.* L. Dunsch. Chem. Eur. J. **14**, 107 (2008).

3. А.И. Мурзашев, ФТТ **62**, 484 (2020).

4. А.И. Мурзашев, А.П. Жуманазаров, ФТТ **64**, 1856 (2022).

Температурные зависимости параметров мессбауэровских спектров тонких пленок $YFeO_3$.

В.В. Изюров*, А.П. Носов, К.А. Меренцова, М.А. Артемьев, И.А. Десятников, С.С. Дубинин

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

*e–mail: koleson01@mail.ru

Большинство исследований физических свойств выполнено для объемных образцов $YFeO_3$ [1], в то время как в современных технологических приложениях востребованы тонкие пленки и наногетероструктуры с толщинами отдельных слоев в нанометровом диапазоне.

Задача исследования состояла в наработке методологии получения изотропных пленок $YFeO_3$ и сравнение их свойств с монокристаллом $YFeO_3$.

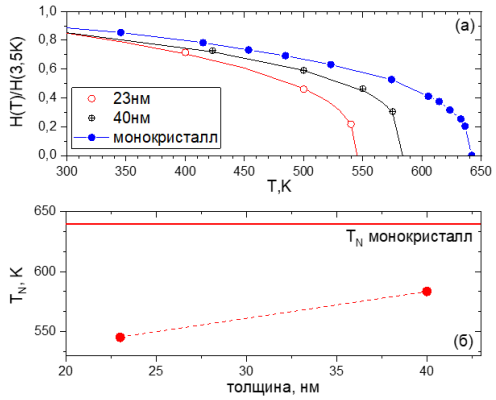


Рис. 1. (а) Температурные зависимости нормированного значения сверхтонкого поля вблизи температуры Нееля. (б) Зависимость температуры Нееля от толщины пленок. Сплошная линия — значение температуры Нееля для монокристалла $YFeO_3$ [3].

Сверхтонкие пленки $YFeO_3$ на подложках r-Al_2O_3 (01-12) были получены методом магнетронного распыления на переменном токе. Послеростовую термообработку выполняли на воздухе при 1073 K в течении 2 часов. Толщину пленок и шероховатость поверхности определяли с помощью оптического профилометра ZYGO. Были получены образцы с толщинами 23 и 40 нм. Типичная величина шероховатости поверхности составляла 0.5 нм. Мессбауэровские спектры измерялись методом рефлектометрии с использованием синхротронного возбуждения на станции ID18 ESRF (г. Гренобль, Франция) при температурах от 3.5 до 650 K. Обработку мессбауэровских спектров проводили с использованием программного пакета [2].

На Рис. 1(а) представлены температурные зависимости значений сверхтонкого поля $H(T)$, нормированных на соответствующую величину при $T = 3.5$ K, в диапазоне $300 - 600$ K. Ход этих зависимостей может быть описан формулой (1), справедливость которой для монокристаллов $YFeO_3$ была подтверждена в [3].

$$\frac{H(T)}{H(3.5\,\mathrm{K})} = D\left(\frac{1-T}{T_\mathrm{N}}\right)^{\beta}, \qquad (1)$$

где $D = 1.16$, $\beta = 0.354$ эмпирические константы, $T_\mathrm{N} = 640$ K — температура Нееля монокристалла $YFeO_3$.

Значения T_N для пленок, см. Рис. 1(б), существенно ниже, чем для монокристалла такого же состава [3]. Эти отличия уменьшаются по мере роста толщины и связаны, по-видимому, с релаксацией структурных параметров пленок.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Функция», номер госрегистрации 122021000035-6).

1. В. Г. Барьяхтар, Б.А. Иванов, М.В. Четкин, УФН **146**, 417 (1985).

2. http://www.esrf.eu/Instrumentation/software/data-analysis/OurSoftware/REFTIM-1.

3. M. Eibschutz, S. Shtrikman, D. Treverst, Phys. Rev **156**, 562 (1967).

Самоорганизация массива квантовых точек на поверхности теллурида висмута

С.Ш. Кахраманов[1]*, Ю.А. Абдуллаев[1], З.И. Бадалова[1], Х.В. Алигулиева[2], Х.В. Оруджова[1], Г.М. Ахмедов[1], Н.А. Абдуллаев[1,3]

[1]Институт физики им.Г.М. Абдуллаева НАНА, Баку, Азербайджан
[2]Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан
[3]Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджан
*e–mail: samir.gahramanov@gmail.com

Слоистые кристаллы Bi_2Te_3 известны как материалы, широко используемые в термоэлектричестве и как топологические изоляторы. Исследованы кристаллы Bi_2Te_3, легированные селеном, с массивом наноостровков-квантовых точек на (0001) поверхности, сформированные на основе эффектов самоорганизации. Исследования свойств массива квантовых точек на поверхности могут быть использованы для получения сенсоров широкого назначения, преобразователей тепловой и солнечной энергии, возможно достичь технологичности в получении топологических изоляторов и управления уровнем Ферми в их приповерхностной зоне, для получения быстродействующих соединений наноустройств и переключателей.

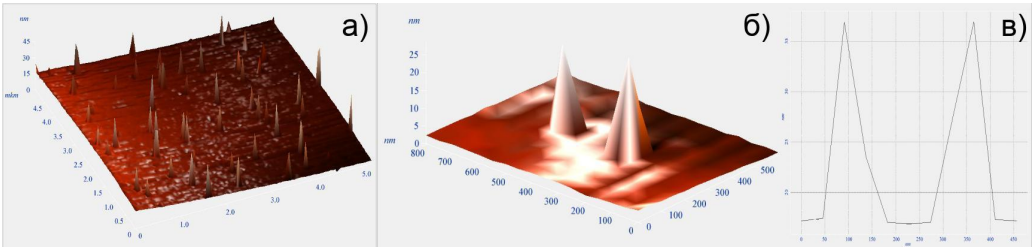


Рис. 1. 3D-изображение массива наноостровков на поверхности Bi_2Te_3<Se> полученные на атомно-силовом микроскопе (АСМ) — а); АСМ-изображение в 3*D*-масштабе фрагмента двух наноостровков Bi_2Te_3<Se> — б); профили двух наноостровков Bi_2Te_3<Se> — в).

Результаты исследования свидетельствуют о формировании локализованных состояний на наноостровках, перенос носителей заряда вдоль массива осуществляется прыжковым механизмом, активированным фононами. Переход из диффузионного в прыжковый транспорт наблюдается при азотных температурах. Показано, что величина прыжковой проводимости коррелирует с уровнем термализации локализованных на них носителей. По-видимому, происходит переход от несвязанных поверхностных состояний к связанному поверхностно-объемному каналу при их гибридизации в условиях термализации заряда на дальнодействующих орбиталях. Прыжковая проводимость может иметь несколько матриц туннелирования в зависимости от энергетического уровня локализованных состояний. Практический интерес представляет вид туннелирования, при котором достигается максимальная плотность переноса заряда при минимальном рассеянии на фононах, что дает возможность увеличения термоэлектрической добротности материала за счет уменьшения теплопроводности. Слабое магнитное поле содействует спиновому упорядочению и постепенному закачиванию заряда, который достигая уровня верхних зон с дальнодействующими орбиталями создает спиновое шунтирование за счет образования орбитального порядка.

Синтез, морфология и оптоэлектронные свойства нанокерамик $MgAl_2O_4$:Графен

А.Н. Киряков[1]*, А.Ф. Зацепин[1], Т.В. Дьячкова[2], А.П. Тютюнник[2], Ю.В. Щапова[3]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Институт геологии и геохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: arseny.kiriakov@urfu.ru

Графен активно используется как связующая добавка во многих конструкционных и функциональных материалах. Известно, что добавка графена увеличивает прочностные характеристики бетона, повышает износостойкость и эластичность многих полимеров, а также может быть использована как упрочняющий компонент многих карбоновых изделий. Целью настоящей работы являлось изучение влияния добавки графена на морфологические и структурно-оптические свойства нанокерамик $MgAl_2O_4$, синтезированных при термобарической обработке.

Нанокомпозиты получены методом термобарического прессования смеси $MgAl_2O_4$ и графена при давлении 6 ГПа и температуре синтеза 600°C. В работе был выполнен комплексный анализ рентгенограмм исходных материалов, а также синтезированного композита. Проведен СЭМ анализ поверхности и сколов композита, а также выполнена оценка спектров оптического поглощения.

Коллаж из СЭМ изображений с разным увеличением представлен на рис. 1. Видно, что композит представляет собой безпористую структуру, сформированную из плотно упакованных наночастиц $MgAl_2O_4$. На верхних рисунках в матрице из наночастиц присутствуют тёмные включения, обусловленные по всей видимости наночастицами графена разной фракции. Крупные частицы, хорошо регистрируемые при приближении $\times$10.0k (верхний левый снимок) имеют неравномерное распределение по композиту, тогда как более мелкие частицы графена имеют равномерное распределение (верхний правый снимок). Графеновые пластины характеризуются малой толщиной, в результате чего частицы, с размером меньше 100 нм плохо различимы.

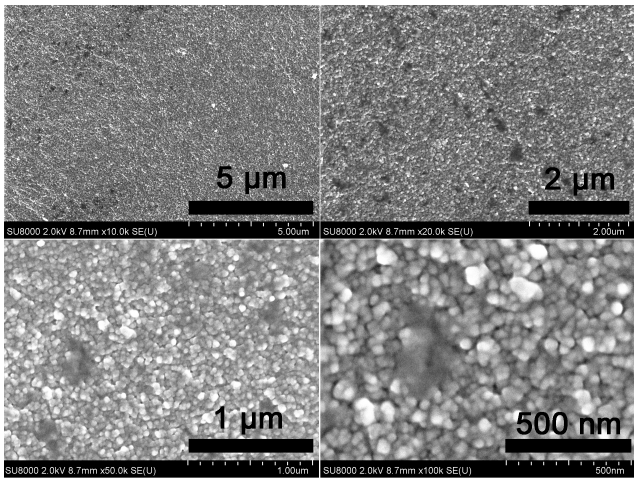


Рис. 1. Коллаж СЭМ изображений нанокомпозита $MgAl_2O_4$:Graphene полученных при разном приближении.

Рентгенофазовый анализ синтезированных нанокомпозитов показал присутствие как фазы шпинели ($MgAl_2O_4$, простр. гр. $Fd3m$), так и графитовой фазы (C-Graphite, простр. гр. $R\bar{3}m$). Наличие графитовой фазы скорее всего обусловлено присутствием стэков графеновых частиц в матрице. Малая концентрация графена не позволяет разрешить методом РФА наличие отдельных графеновых наночастиц.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030».

Собственные магнитные топологические изоляторы и их контакты с различными металлами

И.И. Климовских[1,2*], Д. Естюнин[2], А.М. Шикин[2]

[1]Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
[2]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
*e–mail: klimovskih_ilya@mail.ru

Квантовые материалы с нетривиальной топологией зонной структуры в последние годы привлекают огромное внимание исследователей в области физики твердого тела. Одним из ярких примеров таких материалов являются трехмерные топологические изоляторы, такие как Bi_2Te_3 и Bi_2Se_3 [1]. Инверсия зон в топологических изоляторах приводит к возникновению поверхностных состояний с линейным спектром, которые устойчивы относительно локализации беспорядком. Наличие магнитного порядка в топологических изоляторах приводит к целому ряду интересных эффектов, таких как топологический магнитоэлектрический эффект, а также уникальная фаза аксионного изолятора [2]. Кроме того, поверхностные состояния из-за магнетизма могут перейти в фазу квантового аномального эффекта Холла в котором краевые состояния бездиссипативно переносят ток , что представляет интерес для целого ряда устройств. При наведении сверхпроводящего параметра порядка с помощью эффекта близости краевые состояния становятся майорановскими, что интересно для фундаментальной науки и квантовых вычислений. Однако, реализация магнетизма в топологических изоляторах представляет значительную экспериментальную сложность.

Недавнее открытие фазы собственного магнитного топологического изолятора (СМТИ) в материалах на основе $(Mn(Bi,Sb)_2Te_4)((Bi,Sb)_2Te_3)_m$ позволило объединить магнетизм и топологию в одном соединении и наблюдать квантовый аномальный эффект Холла при достаточно высоких температурах.[3] Такой материал является объемным ферромагнетиком или антиферромагнетиком в зависимости от стехиометрии и допирования. На базе данного материала и наблюдаемых уникальных эффектах уже теоретически предложены десятки прототипов устройств. Однако для эффективного применения магнитных топологических изоляторов в устройствах необходимо решить ряд задач.

В данной работе изучена электронная, атомная, магнитная структуры ряда новых СМТИ, с допированием различными металлами (Ge, Sn, Pb) методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением, сканирующей туннельной и магнитно-силовой микроскопии и СКВИД. Также исследованы контакты поверхности СМТИ со сверхпроводящим (Pb) [4] и топологически-нетривиальным (Bi) металлами с целью эффективного применения СМТИ в квантовых устройствах.

Работа поддержана грантами Санкт-Петербургского государственного университета (ID No. 51126254, https://spin.lab.spbu.ru) и Российского Научного Фонда (no. 22-72-10074).

1. M.Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
2. Y. Tokura, K. Yasuda, A. Tsukazaki, Nat. Rev. Phys. **1**, 126 (2019).
3. M.M. Otrokov, I.I. Klimovskikh *et al.*, Nature **576**, 416 (2019).
4. I.I. Klimovskikh *et al.*, J. Phys. Chem. Lett. **13**, 6628 (2022).

Лазерно-индуцированная печать графена для приложений в электронике

М.С. Комленок*, Н.Д. Курочицкий, П.А. Пивоваров, М.Г. Рыбин
Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия
*e–mail: komlenok@nsc.gpi.ru

Печать графена и создание рисунка без нарушения его исходной структуры является актуальной и сложной задачей для воплощения уникальных физических свойств двумерного материала в нанотехнологиях. Для её реализации мы предлагаем использовать метод лазерно-индуцированного прямого переноса, который был ранее успешно применен для печати других углеродных наноматериалов [1,2]. Схема переноса представлена на рис. 1. В результате лазерного воздействия происходит локальный нагрев тонкого слоя металлического поглотителя на прозрачной для излучения подложке, вызывающий повышение давления и быстрое образование пузыря (блистера), что приводит к выбросу материала в направлении приемной подложки — акцептора. Предложенный подход сокращает количество промежуточных манипуляций с графеновой пленкой, повышая сохранность её структуры. В работе продемонстрирована перспективность печати однослойного графена с металлической ростовой поверхности на произвольную подложку при стандартных условиях. Исследовано влияние параметров процедуры переноса на структуру перенесенных графеновых островков. Показана важность уменьшения расстояния между облучающей и принимающей подложками для переноса графена. Обсуждаются причины наблюдаемого в экспериментах нарушения целостности углеродной пленки. Сохранение исходной кристаллической структуры перенесенного графена в оптимизированных условиях подтверждается спектроскопией комбинационного рассеяния. Снимки сканирующего электронного микроскопа, сделанные под углом к поверхности образцов, показали наличие значительного числа чешуек, обладающих хорошим контактом с приемной металлической подложкой и заметно возвышающихся над его поверхностью (до 10 мкм). Такое позиционирование перенесенного смятого графена, сделало возможным осуществление эффективной электронной эмиссии с катодов, созданных на основе таких перенесенных графеновых образцов. Измеренные характеристики эмиссии сравнимы с характеристиками эмиттеров на основе графена, изготовленными другими методами, несмотря на то, что перенесенные чешуйки графена покрывают в нашем случае не более 18% всей поверхности катода. Максимальный полученный в экспериментах коэффициент усиления поля в таких эмиттерах составил 3300.

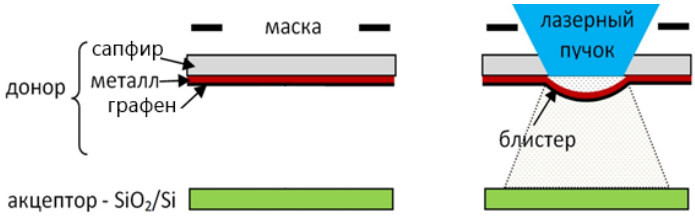


Рис. 1. Схема лазерно-индуцированного прямого переноса графена. Донорная подложка состоит из сапфира, пленки меди и графена. В качестве акцепторной подложки использовался кремний.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 18-72-10158.

1. M.S. Komlenok *et al.*, Phys. Status Solidi A **218**, 2000269 (2021).
2. N.R. Arutyunyan, M.S. Komlenok *et al.*, Las. Phys. **29**, 026001 (2019).

Первопринципные расчёты магнитной анизотропии гетероструктуры Fe/Pt/Fe с учетом релаксации поверхности

М.Ю. Макеев*, М.В. Мамонова

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

*e–mail: mihailmaki603@gmail.com

Магнитная анизотропия (МА) является одним из ключевых параметров магнитных материалов. Это релятивистское проявление связи между спином электрона и орбитальным моментом (спин-орбитальная связь). Модификация электронной структуры на поверхностях, вызывающая изменение магнитной анизотропии, приводит к особому магнитному поведению в ультратонких магнитных пленках, например, к перпендикулярной магнитной анизотропии, индуцированной границей раздела.

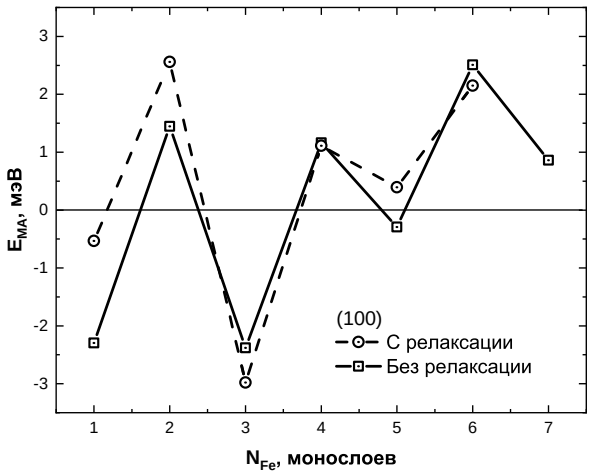


Рис. 1. Зависимость энергии магнитной анизотропии E_{MA} структуры Fe/Pt(100)/Fe от толщины пленки железа с учетом релаксации поверхности.

Для изучения природы магнитной анизотропии в системе Fe/Pt/Fe мы изучили влияние толщины магнитной пленки, фиксируя толщину немагнитной подложки. С помощью программного комплекса VASP, используя псевдопотенциал PBE, была рассчитана энергия магнитной анизотропии E_{MA} для граней (100), (110), (111) для толщины подложки в 3 монослоя и толщинах пленки до 7 монослоев. Ранее нами уже была исследована монослойная пленка [1]. Из рис. 1. видно, что с увеличением толщины изменяется тип преобладающей анизотропии. Данные выводы, для пленок Fe, находят подтверждение в [2], где исследовалась система Fe/Au(100).

Выполнено исследование влияния релаксации на магнитную анизотропию. Показано, что релаксация может повлиять на тип анизотропии, что можно увидеть на рис. 1 для толщины пленки в 5 монослоев. Подобное поведение наблюдалось в работе [3], где для системы Fe/Pt(001) при влиянии релаксации наблюдается смена типа анизотропии. На основе полученных значений E_{MA} был рассчитан параметр анизотропии Δ. Максимальное значение приближения соответствует максимальному значению константы анизотропии $\Delta = 1$. При дальнейшем росте толщины пленки константа анизотропии стремится к нулю.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002). Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН.

1. М. В. Мамонова, М. Ю. Макеев, Д. С. Калинин, ФТТ **63**, 1787 (2021).

2. S. Mankovsky, H. Ebert, Electron. Struct. **4**, 034004 (2022).

3. M. Tsujikawa, A. Hosokawa, T. Oda, Phys. Rev. B **77**, 054413 (2008).

Зависимость фазового состава тонких пленок гематита от температуры термообработки

К.А. Меренцова*, В.В. Изюров, М.А. Артемьев, И.А. Десятников, С.С. Дубинин, А.П. Носов

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

*e–mail: merencovak@imp.uran.ru

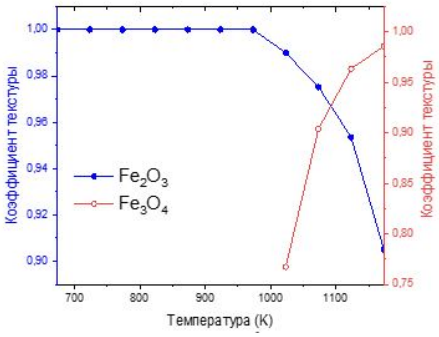


Рис. 1. Зависимость фазового состава плёнок α-Fe_2O_3 толщиной 100 нм от температуры термообработки.

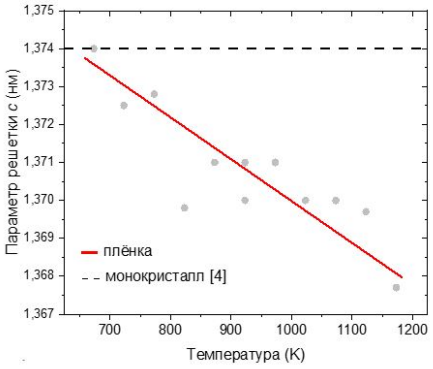


Рис. 2. Зависимость параметра решетки с фазы α-Fe_2O_3 от температуры термообработки. Пунктир — данные для монокристалла [4].

Гематит (α-Fe_2O_3) является антиферромагнетиком ниже температуры Морина 260 K, и «слабым» ферромагнетиком в диапазоне температур от 260 K до температуры Нееля (950 K). «Слабый» ферромагнетизм обусловлен симметрией магнитных подрешеток [1] и анизотропным сверхобменным взаимодействием [2]. Гематит рассматривается как перспективный материал для антиферромагнитной спинтроники [3]. Основные исследования физических свойств гематита были выполнены на объемных материалах (моно- и поликристаллах), а в современных приложениях спинтроники востребованы тонкие пленки и наногетероструктуры. Цель работы — получение тонких плёнок гематита на монокристаллических подложках c-Al_2O_3 и исследование их фазового состава в зависимости от температуры термообработки на воздухе.

Тонкие пленки α-Fe_2O_3 (толщиной 100 нм) получали методом магнетронного распыления стехиометрической мишени на переменном токе в атмосфере 90%Ar + 10%O_2. В процессе распыления температура подложки составляла 473 K. После получения пленки термообрабатывали на воздухе в диапазоне температур 673 – 1173 K в течении 3 часов. Рентгеноструктурные исследования проводили на дифрактометре PANalyticalEmpyrean. Измеряли спектры в больших углах.

Из экспериментальных данных могут быть сделаны следующие выводы. При термообработке до 973 K образцы являются однофазными, см. рис. 1. Начиная с 1023 K происходит формирование дополнительной фазы магнетита Fe_3O_4 доля которой возрастает с ростом температуры за счет уменьшения доли фазы гематита. Параметр решетки c фазы α-Fe_2O_3 меньше, чем для объёмного монокристалла [4], и уменьшается с ростом температуры термообработки (рис. 2).

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», номер госрегистрации 122021000035-6).

1. I. Dzyaloshinsky, JETP. **32**, 1547 (1957).

2. T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).

3. V. Baltz, A. Machnon, M. Tsoi *et. al.*, Rev. Mod. Phys. **90**, 012002 (2018).

4. https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_0545731

Сенсорный элемент на основе сверхрешетки CoFeNi/CuIn с пленочными концентраторами магнитного потока

И.А. Найданов*, М.А. Миляев, В.В. Проглядо, А.Ю. Павлова, А.А. Гермизина, И.К. Максимова
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: ivannayd_1999@mail.ru

Периодические многослойные наноструктуры (сверхрешетки), состоящие из обменно-связанных магнитных слоев, разделенных немагнитными проводящими прослойками, под воздействием магнитного поля способны изменять сопротивление вследствие эффекта гигантского магнитосопротивления (ГМС). Сверхрешетки с ГМС эффектом находят свое применение в качестве сенсорных элементов магнитных полей в различных приложениях. Цель данной работы заключается в создании сенсорного элемента магнитных полей на основе ГМС сверхрешетки с малым гистерезисом, и концентраторов магнитного потока для увеличения чувствительности к малым магнитным полям.

В качестве магниточувствительного материала выступала многослойная наноструктура стекло/Ta/$Ni_{48}Fe_{12}Cr_{40}$/[$Co_{70}Fe_{20}Ni_{10}$/$Cu_{95.3}In_{4.7}$]$_6$/$Co_{70}Fe_{20}Ni_{10}$/Ta, имеющая малый гистерезис на кривой магнитосопротивления порядка 1 – 2 Э, как показано на рис. 1. Малый гистерезис обусловлен оптимальным выбором материалов магнитных и немагнитных слоев [1]. На рис. 2 представлен сенсорный элемент, полученный методом лазерной литографии, состоящий из магниточувствительной сверхрешетки $Co_{70}Fe_{20}Ni_{10}$/$Cu_{95.3}In_{4.7}$ с размерами 10 × 240 мкм^2 и концентраторов магнитного потока толщиной 345 нм. В качестве материала для концентраторов использовался пермаллой $Ni_{80}Fe_{20}$, разделенный прослойками Ta. На рис. 1 сплошной линией изображена кривая магнитосопротивления сенсорного элемента, направление прикладываемого поля показано большой стрелкой на рис. 2.

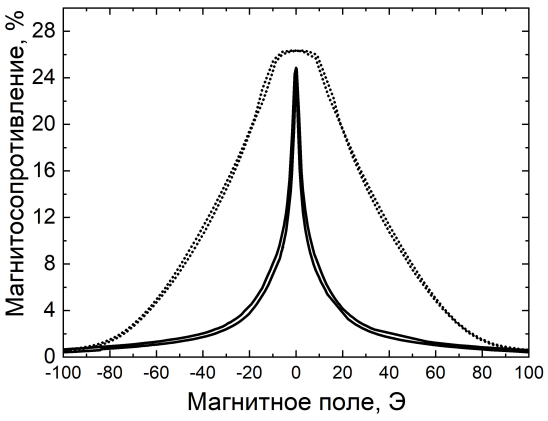


Рис. 1. Кривые магнитосопротивления наноструктуры (штриховая линия) и сенсорного элемента (сплошная линия).

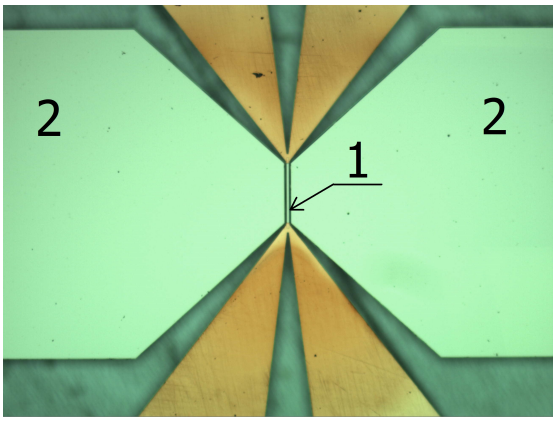


Рис. 2. Фотография сенсорного элемента: 1 — магниточувствительная сверхрешетка $Co_{70}Fe_{20}Ni_{10}$/$Cu_{95.3}In_{4.7}$, 2 — концентраторы.

Полученные результаты свидетельствуют об уменьшении полей насыщения сенсорного элемента при использовании концентраторов магнитного потока, что позволяет детектировать малые магнитные поля до 20 Э с большой чувствительностью до 5%/Э.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России по темам «Спин» 122021000036-3 и «Магнит» 122021000034-9.

1. M.A. Milyaev *et al.*, J. All. Comp. **917**, 165512 (2022).

Оптическое поглощение и симметрии фуллеренов на примере изомеров фуллерена C_{90}

А.И. Мурзашев, М.Ю. Кокурин, С.К. Паймеров*

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия
*e–mail: paymerov@mail.ru

Углеродные наносистемы, углеродные нанотрубки и фуллерены, даже сейчас, по прошествии 30 лет с их открытия остаются под пристальным вниманием физиков. Это связно с тем, что, несмотря на их достаточно простое геометрическое строение, ясного понимания их электронного строения нет и сейчас. Углерод в этих системах находится в sp^2-гибридизированном состоянии, три из четырех валентных электронов углерода образуют жесткие σ-связи, формирующие структуру системы. Четвертый, негибридизированный, электрон, оставаясь как бы свободным, формирует так называемую π-зону. Граница между заполненными и вакантными состояниями лежит в области энергий этих электронов. Вследствие этого все интересные с точки зрения практического применения электронные и оптические свойства этих систем определяются состояниями этих электронов.

До последнего времени электронное строение углеродных наносистем изучалось в рамках модели, учитывающей только перескоки π-электронов между соседними узлами. Однако в [1] было показано, что в углеродных наносистемах кулоновское взаимодействие π-электронов велико и достигает значений $\sim 10-15$ эВ. Это обстоятельство существенным образом меняет электронное строение и требует описание электронных свойств фуллеренов и других углеродных наносистем в рамках модели Хаббарда. Нами в настоящей работе в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций [2] были вычислены энергетические спектры изомеров № 1, 6, 16 и 46 фуллерена C_{90}.

Кроме этого, нами для верификации наших результатов с экспериментальными данными были получены спектры оптического поглощения (СОП) исследованных систем. Для этой цели был проведен теоретико-групповой анализ, в результате которого были получены правила отбора и установлено соответствие каждого энергетического уровня с неприводимыми представления группы симметрии каждого изомера.

Сравнение полученных нами СОП с имеющимися экспериментальными данными [3,4] демонстрирует хорошее качественное согласие.

1. T.O. Wehling, E. Şaşıoğlu, C. Friedrich *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106**, 236805 (2011).
2. R.R. Nigmatulin, V.A. Toboev, Theor Math Phys. **80**, 736 (1989).
3. K. Kikuchi, N. Nakahara, T. Wakabayashi *et al.*, Chem. Phys. Lett., **188**, 177 (1992).
4. Hua Yang, Christine M. Beavers, Zhimin Wang *et al.*, Angew. Chem. Int. Ed. **49**, 886 (2010).

Фотосенсибилизация активных форм кислорода наночастицами диоксида титана, декорированными квантовыми точками PbS

А.С. Перепелица*, С.В. Асланов, Ф.А. Цыбенко

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
*e–mail: a-perepelitsa@yandex.ru

Разработка фотокатализаторов различных составов, обладающих протяженным спектром оптического поглощения и высокой эффективностью продуцирования активных форм кислорода, является актуальной научной и технологической задачей [1]. Один из подходов для ее решения является разработка методик сенсибилизации наночастиц (НЧ) широкозонных полупроводников (TiO_2, ZnO, ZnS и др.) за счет формирования нанокомпозитов с молекулами органических красителей и коллоидными квантовыми точками (КТ) [1].

В данной работе разработана методика декорирования наночастиц диоксида титана (НЧ TiO_2) коллоидными квантовыми точками PbS (КТ PbS), синтезированными в рамках водного синтеза в растворах пассиваторов (тиогликолевой (PbS/TGA), 2-меркаптопропионовой (PbS/2-MPA) или 3-меркаптопропионовой (PbS/3-MPA) кислот). Средний размер КТ PbS, согласно данным просвечивающей электронной микроскопии, составлял для КТ PbS/TGA — 2.9 ± 0.5 нм, для КТ PbS/2-MPA — 3.1 ± 0.7 нм и для КТ PbS/3-MPA — 2.7 ± 0.4 нм. НЧ TiO_2 обладали средним размером 10 нм и кристаллической структурой анатаза.

Спектры оптического поглощения всех приготовленных образцов представляют собой широкие бесструктурные полосы со слабыми особенностями в районе 1000 нм, соответствующими экситонному переходу. Для исследованных образцов зарегистрирована фотолюминесценция с максимумом в районе 1140 нм при возбуждении излучением из видимой области спектра. В случае КТ PbS/2-MPA и PbS/TGA спектры люминесценции имеют явную асимметрию с длинноволновой стороны. Полуширина полос в зависимости от типа пассиватора составляла 275 нм (0.25 эВ) для КТ PbS/TGA, 345 нм (0.33 эВ) для КТ PbS/2-MPA и 270 нм (0.27 эВ) для КТ PbS/3-MPA. Стоксов сдвиг максимума люминесценции относительно особенности в оптическом поглощении составлял 140 нм ($\sim$ 0.15 эВ). Характерной особенностью наблюдаемой люминесценции являются большие времена жизни от 2.5 до 4.5 мкс в зависимости от типа использованного пассиватора.

Формирование агрегатов НЧ TiO_2/КТ PbS приводит к тушению люминесценции КТ до 5 раз вне зависимости от типа пассивирующих молекул. Экспериментальные данные показывают, что формирование агрегатов НЧ TiO_2/КТ PbS обеспечивает сенсибилизацию фотокатализатор к излучению из видимой области спектра. При этом наблюдается продуцирование активных форм кислорода (гидроксильный радикал ($\cdot OH$), перекись водорода (H_2O_2), синглетный кислород ($^1O_2$)). Сенсибилизация НЧ TiO_2 при декорировании КТ PbS ассоциирована с переносом зарядов между компонентами нанокомпозита. Полученные экспериментальные данные свидетельствует о пригодности разработанного нами метода для сенсибилизации НЧ TiO_2 к излучению из видимой области спектра.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ МК-4406.2022.1.2.

1. M. Tahir, M. Rafique, M. Rafique, In Micro and Nano Technologies, Nanotechnology and Photocatalysis for Environmental Applications. — Amsterdam: Elsevier Inc. (2020).

Управляемая модификация атомной структуры сверхрешёток Fe/Gd с помощью гидрирования

А.А. Рыжова[1,2]*, Е.А. Кравцов[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: a.a.ryzhova@imp.uran.ru

Контролируемое и обратимое насыщение наноструктур водородом — один из перспективных способов управления их магнитным состоянием, развитие которого будет способствовать достижению прогресса в создании новых материалов наноспинтроники. Редкоземельные металлы легко поглощают водород из окружающей атмосферы и, при помещении сверхрешеток Fe/Gd в атмосферу водорода при малых давлениях, водород будет концентрироваться в слоях Gd. Варьируя давление водорода, можно контролируемым образом изменять концентрацию водорода в слоях Gd, изменяя их структурные, магнитные и электронные свойства. Для обеспечения проникновения водорода в наноструктуры при комнатной температуре необходимо наличие каталитического тонкого слоя Pd или Pt на поверхности. В настоящей работе мы показываем, что в качестве катализатора при гидрировании может использоваться значительно более дешевый слой Ni.

Сверхрешетки Al_2O_3/Nb(10нм)[Fe(3.5нм)/Gd(1.4нм)]$_{20}$/Nb(10нм)/Ni(10нм) помещались в атмосферу водорода различного давления при комнатной температуре на 6 часов, изменение их структурных свойств контролировалось *ex-situ* с помощью рентгеновской дифрактометрии и рефлектометрии. На рис. 1 представлены дифрактограммы и рентгенограммы, измеренные до и после насыщения сверхрешетки водородом.

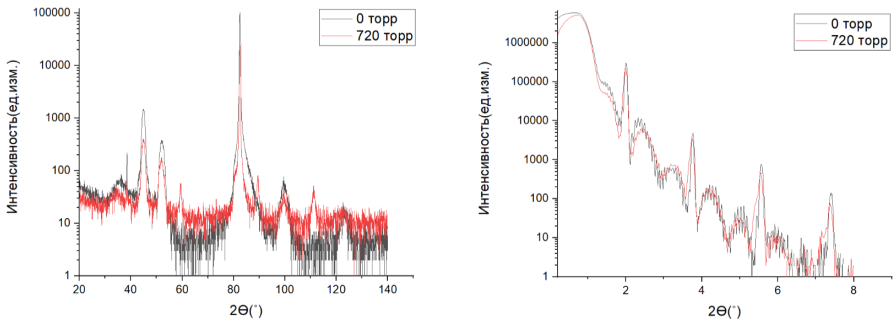


Рис. 1. Рефлектограммы и дифрактограммы от сверхрешетки, измеренные до и после гидрирования.

На рефлектограммах видно, что после гидрирования наблюдается смещение сверхрешеточных рефлексов в область меньших углов, что предполагает увеличение периода сверхрешетки из-за проникновения в нее водорода. Из анализа дифрактограмм установлено, что после гидрирования помимо ГПУ Gd появляются дополнительные фазы GdH_2 и GdH_3, водород также проникает в слои Nb. Структурные параметры в слоях Fe и Ni не изменяются.

Таким образом, экспериментально установлено, что можно проводить гидрирование сверхрешеток Fe/Gd, используя в качестве катализатора слой Ni, водород концентрируется в слоях Gd, способствуя образованию гидридов гадолиния. Гидрирование может эффективно использоваться для контролируемой модификации атомной структуры сверхрешеток Fe/Gd.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Спин» № 122021000036-3).

Плёночные металлические наноструктуры для спин-орбитроники

Е.А. Суржиков[2], М.Е. Стеблий[1], А.В. Огнев[1], А.С. Самардак[1], А.В. Телегин[2]*

[1]Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: telegin@imp.uran.ru

Спин-орбитроника (раздел спинтроники) изучает процессы переноса спинового вращательного момента (SOT) за счет спин-орбитального взаимодействия в структурах типа тяжелый металл-ферромагнетик (ТМ-ФМ) [1]. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к тому, что в наноструктурах ТМ-ФМ помимо магнитного затухания на границе тяжелого металла и покрывающего его магнитного слоя возникает интерфейсное взаимодействие Дзялошинского-Мория (ВДМ) [2]. Это антисимметричное взаимодействие ведет к трансформации ФМ порядка и появлению нетривиальных спиновых текстур, таких как скирмионы [3]. Такие спиновые текстуры имеют громадный потенциал для электроники будущего, играя роль энергонезависимых носителей информации. В связи с этим возникает вопрос о возможности управления намагниченностью, например, с помощью тока, а также о влиянии межслоевого обменного взаимодействия на перенос вращательного момента в металлических наноструктурах. Для ответа на вопросы на первом этапе работы методом магнетронного распыления были синтезированы тонкопленочные наноструктуры ТФ-ФМ: (Ru(толщина слоя 10 Å)/Co(0.8)/Ru(2)/W(4), W(4)/[Tb(0.6)/Co(1.4)]$_3$/Ru(2), Pt(5)/Co(0.8)/MgO(2)/Pt(2)). Второй этап заключался в аттестации полученных наноструктур.

Согласно экспериментальным магнитометрическим данным, все образцы обладают перпендикулярной магнитной анизотропией и демонстрируют отклик на прохождение постоянного тока за счёт индуцированного спин-поляризованного тока в структуре. Процесс изменения намагниченности под действием постоянного тока был подтверждён наблюдением за динамикой доменной структуры в микроскопии Керра. Примеры полученных результатов для структуры Pt/Co/MgO/Pt приведены на рис. 1. Важным результатом является то, что все синтезированные образцы имели линейную зависимость индуцированного в ФМ слое локального магнитного поля от величины тока, а также показывали высокую эффективность токоиндуцированного переключения намагниченности — около 40 %.

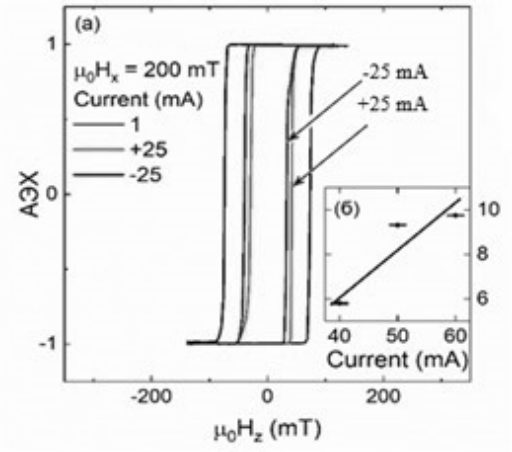


Рис. 1. (а) — петля гистерезиса аномального эффекта Холла, (б) — зависимость токоиндуцированного поля от тока.

Таким образом полученные образцы наноструктур могут быть рекомендованы для изучения ВДМ и процессов передачи спин-орбитального крутящего момента импульса (SOT) методами Бриллюэновской спектроскопии, Спин-Холл эффекта и т.д.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (№ 21-72-20160), Министерства науки и высшего образования России (№ 0657-2020-0013) и Мегагранта (№ 075-15-2021-607).

1. A. Manchon, A. Belabbes, Solid State Physics, Academic Press. **68**, 89 (2017).

2. A. Kolesnikov, M.Stebliy, A. Ognev *et al.*, Journal of Physics D: Applied Physics, **49**, 42 (2016).

3. J. Park, T. Kim, Gyu Won Kim *et al.*, Acta Materialia. **241**, 035004 (2022).

Модифицированный нанотубулярный TiO_2 для удаления Cr(VI) из водных растворов под действием видимого света

А.А. Сушникова*, Н.В. Печищева, П.В. Зайцева, А.А. Рempель

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: sushnikova.ann@gmail.com

Шестивалентный хром Cr(VI) — экотоксикант, содержащийся в сточных водах металлургических предприятий. Фотосорбция (ФС) на диоксиде титана (TiO_2) — один из методов, позволяющих эффективно удалить хром из водных растворов. TiO_2 известен как фотокатализатор, способный под действием UV-излучения восстановить Cr(VI) до менее токсичного Cr(III) [1]. Для использования TiO_2 под действием видимого света нужно уменьшить ширину запрещенной зоны полупроводника. В статье [2] авторы успешно модифицировали TiO_2: отжиг в потоке водорода привел к формированию кислородных вакансий и созданию дополнительного энергетического уровня внутри запрещенной щели, что привело к эффективному уменьшению ширины запрещенной зоны с 3.3 до 2.6 эВ.

Нанотубулярный TiO_2 (NT-TiO_2) был синтезирован методом анодирования титановой фольги, затем механически отделялся от подложки. Отжиг нанотрубок TiO_2 проводился в потоке водорода в трубчатой печи в течение 2 и 4 ч при температуре 400°C. Рентгенофазовый анализ (РФА) NT-TiO_2 был выполнен на автодифрактометре с высокой статистикой. Удельная площадь поверхности (УПП) была измерена с использованием анализатора адсорбции газов (азот). Значения энергий запрещенной зоны определялись из спектров диффузного отражения с использованием функции Кубелки-Мунка. Сорбцию хрома из раствора Cr(VI) с концентрацией 4 мг/л проводили в течение 3 ч (20 мг сорбента на 15 мл раствора); без освещения — в ротационном смесителе, под освещением — с использованием натриевой лампы ДНаЗ-150 Вт. Общую концентрацию хрома после сорбции определяли на атомно-эмиссионном спектрометре с индуктивно связанной плазмой, концентрацию Cr(VI) — фотометрически по окраске комплекса с 1,5-дифенилкарбазидом.

Согласно РФА, синтезированный NT-TiO_2 имеет аморфную структуру. После отжига наблюдаются рефлексы, соответствующие фазе анатаз. УПП для синтезированных NT-TiO_2 составила 16 м^2/г. Отжиг в течение 2 ч привел к повышению УПП до 43 м^2/г, однако отжиг продолжительностью 4 ч понижает значение УПП до 31 м^2/г в результате спекания частиц. Ширина запрещенной зоны в случае прямого перехода после отжига уменьшилась с 3.3 до 3.1 эВ.

Без воздействия излучения все три образца NT-TiO_2 показали низкую сорбцию общего хрома, не превышающую 11%. При облучении видимым светом немодифицированный NT-TiO_2 показал сорбцию на уровне 36%. Отжиг в водороде 2 и 4 ч приводит к значительному повышению сорбции хрома — до 94% и 90% соответственно. Степень удаления Cr(VI) для модифицированных образцов под действием видимого света составляет 99% и 94%, соответственно.

Исследование поддержано проектом РНФ № 21-73-20039.

1. Q. Cheng *et al.*, Appl. Catal. B **176**, 740 (2015).

2. I. B. Dorosheva *et al.*, AIP Conference Proceedings **2174**, 020019 (2019).

Механохимический синтез заполненных скуттерудитов p-типа проводимости

Е.В. Чернышова*, А.П. Новицкий, И.А. Сергиенко, А.И. Воронин, В.В. Ховайло

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
*e–mail: m152292@edu.misis.ru

Скуттерудиты — одни из наиболее эффективных термоэлектрических (ТЭ) материалов в интервале температур 700 – 1000 К. В последние годы был достигнут значительный прогресс с точки зрения увеличения их термоэлектрической добротности [1]

$$zT = S^2\sigma T/\kappa, \tag{1}$$

где S — коэффициент Зеебека, σ — удельная электропроводность, κ — теплопроводность, T — абсолютная температура.

Однако с индустриальной точки зрения наряду с высоким показателем zT требуется быстрый и масштабируемый метод получения материалов с минимальными энергозатратами, т.к. традиционные методы получения скуттерудитовых соединений включают в себя длительные высокотемпературные отжиги в кварцевых ампулах, во время которых сложно контролировать стехиометрию, кроме этого, масса получаемого материала мала. В связи с этим вызывает особый интерес получение ТЭ материалов методами порошковой металлургии, такими как механохимический синтез (МС) и реакционное искровое плазменное спекание (РИПС).

В данной работе методом МС с последующим искровым плазменным спеканием (ИПС) были получены наполненные скуттерудиты p-типа $(Ln_{0.75}Ce_y)Fe_{3.5}Co_{0.5}Sb_{12}$ (где Ln = La или Yb, y = 0 или 0.25). В рамках отработки процесса получения фазы был проведен высокоэнергетический шаровой помол смеси исходных компонентов в виде элементарных порошков La, Fe, Co и Sb в течение 15, 30 и 60 минут для получения фазы $LaFe_{3.5}Co_{0.5}Sb_{12}$. Эмпирически установленные параметры синтеза были использованы для получения двухзаполненных скуттерудитов. Однако, следует отметить, что для $Yb_{0.75}Ce_{0.25}Fe_{3.5}Co_{0.5}Sb_{12}$ стабилизация фазы энергетически менее выгодна, поэтому после 15 мин помола в образце помимо основной присутствуют еще две фазы — сурьма и антимонид иттербия, как показано на рис. 1(a). Все полученные порошки были консолидировали методом ИПС при 823 К. Фаза скуттерудита полностью распадается после ИПС порошков, полученных помолом в течении 30 мин. Напротив, в механоактивированных порошках 15-ти минутного помола процесс фазообразования продолжается во время спекания (РИПС). По данным рентгенофазового анализа образцы содержат $\sim$ 90 мас. % фазы скуттерудита. Коэффициент Зеебека, температурная зависимость которого приведена на рис. 1(b), имеет значения, близкие к литературным, где образцы получены традиционным методом — с использованием длительных отжигов [2,3].

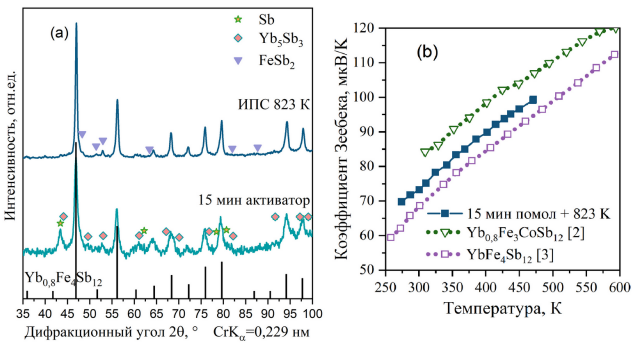


Рис. 1. Свойства скуттерудита номинального состава $Yb_{0.75}Ce_{0.25}Fe_{3.5}Co_{0.5}Sb_{12}$ (a) — результаты РФА, (b) — коэффициент Зеебека.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 19-79-10282.

1. G. Rogl *et al.*, Curr. Opin. Green Sustain. Chem. **4**, 50 (2017).
2. C. Zhou *et al.*, Intermetallics **19**, 1390 (2011).
3. V.L Kuznetsov, D.M. Rowe, J. Phys. Condens. Matter **12**, 7915 (2000).

Влияние добавок теллурида марганца на термоэлектрические свойства сплава Гейслера

К.А. Щербакова[1]*, А.С. Ханина[1], А.П. Новицкий[1,2], И.А. Сергиенко[2,3], В.В. Ховайло[1]

[1]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
[2]Национальный институт материаловедения, Япония, Цукуба
[3]Университет Цукуба, Япония, Цукуба
*e–mail: 19ksenia09@mail.ru

Большая часть всей первичной энергии, потребляемой в мире, теряется в виде тепла. Данная проблема привела к востребованности термоэлектрических материалов и устройств, способных повысить энергоэффективность за счет сбора различных форм энергии и преобразования ее в электричество. Эффективность такого преобразования описывается параметром, называемым термоэлектрическая добротность [1]:

$$zT = \frac{S^2\sigma}{\kappa_{эл} + \kappa_{реш}} T \qquad (1)$$

где S — коэффициент Зеебека, σ — электропроводность, $\kappa_{эл} + \kappa_{реш}$ — электронная и решёточная составляющие теплопроводности соответственно, T — абсолютная температура.

Одним из перспективных подходов увеличения добротности на сегодняшний день считается создание объёмных нанокомпозитов. Использование данного метода, позволяет оптимизировать параметры структуры, за счёт сохранения достаточно высоких показателей фактора мощности и увеличения рассеяния фононов на границах раздела матрица/включения, приводящих к снижению теплопроводности.

В ряде теоретических исследований было обнаружено, что сплав Гейслера Fe_2TiSn обладает высоким фактором мощности [2-4], но при этом имеет высокую теплопроводность [5], снижение которой может помочь в увеличении эффективности данного материала. Так же установлено, что халькогениды переходных металлов, используемые в виде включений позволяют улучшить термоэлектрические характеристики материала [6].

Целью данной работы является снижение теплопроводности за счет создания композиционных материалов на основе матрицы из сплава Гейслера Fe_2TiSn и наполнителя из теллурида марганца MnTe. В результате работы получены образцы композитов химического состава: $Fe_2TiSn + x\cdot MnTe$ (где x = 0, 2, 4, 6 масс.%). Предполагается, что одним из основных эффектов позволяющих снизить общую теплопроводность является повышение рассеяния фононов на границах раздела матрица/включения, приводящее к снижению решеточной составляющей теплопроводности. Детальные результаты измерений будут представлены в докладе.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (проект № 21-12-00405).

1. А.Ф. Иоффе, Полупроводниковые термоэлементы. — М.: АН СССР (1960).
2. E.J. Skoug, J. Electron. Mater. **38**, 1221 (2009).
3. M. Vasundhara, V. Srinivas, V.V. Rao, Phys.Rev. B **77**, 224415 (2008).
4. B. Hinterleitner, Nature **576**, 85 (2019).
5. Y. Nishino, S. Deguchi, U. Mizutani, Phys.Rev. B **74**, 115115 (2006).
6. J. Dong *et al.*, J. Mater. Chem. C **6**, 4265 (2018).

Сверхпроводимость и физика низких температур

Отличие пиннинга вихревой структуры высокотемпературных сверхпроводящих лент 2-го поколения различного состава, облученных ионами различной энергии

П.Н. Дегтяренко[1]*, С.Ю. Гаврилкин[2], А.Ю. Цветков[2], А.В. Овчаров[3], А.Ю. Дегтяренко[2]

[1]Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
[3]Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
*e–mail: degtyarenkopn@gmail.com

Создание центров пиннинга в сверхпроводящих материалах с помощью облучения высокоэнергетическими ионами является одним из способов улучшения характеристик промышленных высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) лент 2-го поколения в сильных магнитных полях. Во многих случаях такой метод использует тяжелые ионы с очень высокой энергией в несколько сотен МэВ на циклотронах. Этот подход является очень эффективным для улучшения свойств критического тока (I_c) от внешнего магнитного поля (H) пленок. Несколько лет назад было показано, что облучение сверхпроводящих лент ионами Au и Cu меньшими энергиями также может улучшать их характеристики во внешних магнитных полях различной ориентации (θ). Оба подхода являются весьма перспективными инструментами для исследования критической поверхности ВТСП и пиннинга вихревой структуры. Более того, исследование микроструктуры облученных ВТСП и анализ полученных результатов позволит развить существующие методики увеличения плотности критического тока и позволит создать метод для практического применения при процессе перемотки ВТСП ленты с катушки на катушку для создания длинномерных облученных ВТСП лент 2-го поколения. В настоящей работе мы исследовали влияние облучения ионами Au с энергией 18 МэВ и никелем с энергией 12 МэВ на ВТСП лентах 2-го поколения различного состава RBaCuO (R = Gd, Y, Eu и Nd/Eu/Gd), нанесенных методом импульсного лазерного осаждения (ИЛО) на буферные подложки с архитектурой Hastelloy/IBAD-MgO/LaMnO. Типичные дозы облучения варьировались в диапазоне $10^{12} - 10^{13}$ см$^{-2}$ для нахождения оптимальных условий облучения. Сверхпроводящие свойства и их полевые зависимости для полученных образцов измеряли с помощью установки PPMS при 77, 65, 50 и 40 K, а также прямыми измерениями зависимостей $I_c(H,\theta)$ с использованием сильнопольного магнита. Кривые удельного сопротивления образцов были также измерены с помощью PPMS в диапазоне полей от 0 до 9 кЭ в ориентации от $H \parallel c(\theta = 0)$ до $H \parallel ab(\theta = 90)$ с шагом 30°. В данном случае кривые получены по 4-зондовой методике при измерительном токе 100 мА. Из этих кривых была получена температура необратимости (T_{irr}) начала резистивного перехода. Мы перестроили кривые $T_{irr}(H)$ как линии поля необратимости $T_{irr}(H)$ и масштабировали эти данные, используя соотношение для эффективного поля: $H_{eff} = H\sqrt{\gamma \sin^2\theta + \cos^2\theta}$. Одновременно с электрофизическими измерениями была исследована микроструктура образцов до и после облучения с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Было обнаружено, что в целом оптимальная доза ионного облучения улучшает I_c лент в зависимости от H. Однако степень такого усиления зависит от состава сверхпроводящего материала (довольно слабым для YBaCuO и наиболее выраженным для многослойных систем типа (Nd/Eu/Gd)BaCuO/EuBaCuO+$BaHfO_3$). Обнаружено, что повышение критического тока наблюдается для температур $40 - 70$ K и поля в диапазоне от $1 - 7$ Тл: 100 А на 4 мм ширины ленты при 77 K, 1 кЭ, 200 А на 4 мм ширины ленты при 65 K, 2 кЭ и 400 А на 4 мм ширины ленты при 40 K и 5 кЭ. Полученные результаты свидетельствуют о разном механизме пиннинга вихревой структуры в образцах.

Сверхпроводниковая система левитации в зазоре между двумя магнитными телами

М.С. Захаров
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e–mail: maksim.s.zakharov@gmail.com

Системы левитации на основе массивных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) и постоянных магнитов (ПМ) представляют значительный интерес для разработки поездов на магнитном подвесе [1], маховичных накопителей энергии [2] и бесконтактных подшипников [3]. Усилия исследователей в этой области, с одной стороны, нацелены на увеличение ключевого параметра данных систем — подъемной силы, действующей на объект левитации, а с другой, на обеспечение вертикальной и горизонтальной устойчивости подвеса по отношению к малым смещениям левитирующего тела от положения равновесия.

В соответствии с характером силового взаимодействия между ВТСП и ПМ, все традиционно рассматриваемые системы магнитной левитации можно разделить на два типа: системы, в которых подъемная сила является силой отталкивания ВТСП от ПМ, и системы с притяжением между ними. Каждая из них обладает своими характерными особенностями зависимости подъемной силы от высоты левитации и определенными недостатками, ограничивающими их практическое применение.

В настоящей работе предложена к рассмотрению новая система магнитной левитации, в которой одновременно реализуются и силы притяжения, и силы отталкивания между ВТСП и ПМ. Данная система состоит из трех тел, располагающихся на единой вертикальной оси, с левитирующим объектом посередине. Целью работы является поиск конфигураций с максимальной подъемной силой, а также анализ областей вертикальной и горизонтальной устойчивости левитации. Методом численных расчетов исследованы различные варианты системы: ВТСП, левитирующий в зазоре между двумя ПМ с сонаправленным или с противоположно направленным намагничиванием, и ПМ, левитирующий в зазоре между двумя ВТСП. В работе для каждого варианта системы рассмотрены реализующиеся в сверхпроводнике распределения плотности токов, представлены характерные зависимости подъемной силы от высоты левитации и величины зазора, в котором находится объект. На основе градиентов действующих сил, получены объединенные диаграммы устойчивой, вертикально/горизонтально неустойчивой областей левитации для исследуемой системы.

Результаты расчетов показывают, что конфигурация системы с левитацией ВТСП между двумя ПМ, имеющими противоположные направления намагниченности, обладает и необходимой устойчивостью подвеса в середине левитационного зазора, и способностью удерживать в несколько раз большие весовые нагрузки по сравнению с традиционно рассматриваемыми системами магнитной левитации. Также было определено, что результирующая сила, действующая на объект левитации в центре зазора, зависит от величины зазора. С практической точки зрения это означает, что можно управлять параметрами системы (требуемая подъемная сила и высота левитации) не только с помощью изменения величины магнитного поля источников, но и меняя величину зазора.

1. P. Bernstein, J. Noudem, Supercond. Sci. Technol. **33**, 033001 (2020).
2. T. Mukoyama et al., IEEE Trans. Appl. Supercond. **25**, 4603904 (2015).
3. J.R. Hull, Supercond. Sci. Technol. **13**, R1 (2000).

Взаимодействие спинового и абрикосовского вихря в допированном топологическом изоляторе

А.В. Капранов[1,2,3]*, Р.Ш. Акзянов[1,2,3], А.Л. Рахманов[1,2,3]

[1]Московский физико-технический институт, Москва, Россия
[2]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н. Л. Духова, Москва, Россия
[3]Институт теоретической и прикладной электродинамики, Москва, Россия
*e–mail: kapranov.av@phystech.edu

В последние несколько лет получено множество доказательств существования нематической сверхпроводимости в допированных топологических изоляторах [1]. В таких системах – как $A_x Bi_2 Se_3$, где $A = Cu, Nb, Sr$, сверхпроводящий параметр порядка это двухкомпонентный действительный вектор с E_u симметрией. Таким образом, в данных сверхпроводниках куперовские пары имеют спин-триплетное спаривание. В E_u представлении сверхпроводящий параметр порядка обладает симметрией относительно обращения времени. Это значит, что E_u симметрия нарушает симметрию инверсии и взаимодействуют электроны с одинаковой проекцией спина, но с разных орбиталей.

Нематическая сверхпроводимость имеет нетривиальную связь с деформацией. Эта связь приводит к следующим интересным эффектам: спонтанной деформации [2], появлению спиновых вихрей [3] и анизотропии второго критического поля [4]. Спиновые вихри в контексте сверхпроводимости обсуждены для $\left(p_x + ip_y\right)_\uparrow \left(p_x - ip_y\right)_\downarrow$ топологических сверхпроводников в [5]. В [3] показано, что могут существовать два топологически разных спиновых вихря в допированном топологическом изоляторе.

Используя теорию Гинзбурга-Ландау (ГЛ) для нематического сверхпроводника с векторным параметром порядка, мы учитываем вклад градиентных членов и, решая уравнения ГЛ, мы показываем, что существует однокомпонентное решение, которое соответствует вихрю Абрикосова. Далее находим энергию вихря Абрикосова и получаем первое критическое поле. Потом мы находим критическую деформацию, при которой возникает спиновый вихрь. Теперь мы можем рассмотреть взаимодействие спинового вихря и вихря Абрикосова. Рассматриваем случай сосуществования этих двух вихрей на расстоянии ρ, где $\xi < \rho \ll \lambda$, ξ это длина когерентности, λ это лондоновская глубина проникновения. Получаем, что они притягиваются из-за вклада Абрикосовского вихря в фазу параметра порядка. Таким образом, в основном состоянии вихри будут иметь общий кор, и спиновый вихрь может быть рассмотрен как центр пиннинга для вихря Абрикосова.

Это открывает дорогу к исследованию электронных свойств в нематическом сверхпроводнике и поиску экзотических частиц Майорана, которые необходимы для создания топологически защищенного квантового компьютера.

Р.Ш.А. и А.В.К. выражают благодарность за поддержку в рамках проекта РНФ № 22-72-00032.

1. S. Yonezawa, Condens. Matter **4**, 2 (2019).
2. R.S. Akzyanov, A.V. Kapranov, A.L. Rakhmanov, Phys. Rev. B **102**, 100505(R) (2020).
3. R.S. Akzyanov, A.L. Rakhmanov, Phys. Rev. B **104**, 094511 (2021).
4. A.Y. Kuntsevich *et al.*, Phys. Rev. B **10**, 224509 (2018).
5. C.-K. Chiu, J.C. Teo, A.P. Schnyder, S. Ryu, Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 (2016).

Особенности разработки температурного контроллера для криогенных экспериментов

А.Н. Самарин*, Н.А. Самарин, А.В. Богач

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия
*e–mail: sasha@lt.gpi.ru

Температурные контроллеры предназначены для измерения, регулирования и стабилизации температуры в криогенных системах, включая измерительные ячейки криостатов, системы термостатирования полупроводниковых приборов и сенсоров, а также требующих прецизионного контроля температуры модулях промышленных криогенных установок. Для измерения температуры чаще всего применяются резистивные датчики температуры (RTD), диоды и термопары. При работе с низкими температурами наиболее высокую чувствительность показывают резистивные датчики температуры с отрицательным температурным коэффициентом сопротивления (ТКС), которые меняют сопротивление в диапазоне от десятков ом (при комнатной температуре) до десятков кОм (при гелиевых температурах). Основной проблемой при измерении сопротивления такого датчика температуры является проблема перегрева датчика током возбуждения (например, при использовании стандартных мультиметров общего назначения), что приводит к существенному искажению результатов измерений. При самостоятельной реализации типовой схемы измерения сопротивления путем стабилизации тока через датчик и измерения напряжения на датчике, во избежание перегрева датчика необходимо реализовать многократное изменение величины тока через датчик, что зачастую приводит к дефектам измерений и необходимости «сшивки» (коррекции) экспериментальных данных.

В докладе будут показаны особенности реализации нового температурного контроллера на основе схемы стабилизации напряжения на датчике сопротивления с отрицательным ТКС, позволяющего измерять и стабилизировать температуру с относительной точностью не хуже $2 \cdot 10^{-4}$ в температурном диапазоне от 2 до 300 К (на примере датчика `LakeShore Cernox`) без перегрева датчика даже в условиях установки в вакуумной полости криостата.

Влияние флуктуаций на критические свойства необычных сверхпроводников в рамках вариационной теории возмущений

Ф.М. Сираев*, М.В. Авдеев, Ю.Н. Прошин

Казанский федеральный университет, Казань, Россия
*e–mail: siraev.f@gmail.com

Вариационная теория возмущений широко применяется для описания различных систем [1], в частности в области физики фазовых переходов [2]. Нами предложен метод для расчета температурной зависимости сверхпроводящего параметра порядка в необычных сверхпроводниках на основе вариационной теории возмущений. В нашей теоретической модели мы рассматриваем сверхпроводящее спаривание в d-wave канале следующего вида:

$$V = -2J\cos\varphi_1\cos\varphi_2,$$

где J — константа связи, φ — угол на контуре Ферми.

В отличие от стандартных подходов, такая процедура позволяет рассматривать флуктуационную область ($T > T_c$), где отсутствует дальний порядок (т.е. $\langle\Delta(\varphi)\rangle = 0$). Однако в рамках предложенной схемы оказывается возможным найти и проанализировать температурную и угловую зависимость квадрата дисперсии параметра порядка $\langle\Delta^2(\varphi)\rangle$:

$$\langle\Delta^2(\varphi)\rangle \sim \int D[\Delta,\Delta^*]\Delta(\varphi)\Delta^*(\varphi)e^{-F[\Delta,\Delta^*]/T},$$

где F — эффективная свободная энергия, полученная в рамках схемы вариационной теории возмущений. Результаты численных расчётов показывают, что вклад в угловую зависимость вносят и компоненты высших порядков.

Полученные результаты мы связываем с одним из возможных механизмов образования псевдощелевого состояния [3,4] в необычных сверхпроводниках.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.

1. A. Sissakian, I. Solovtsov, O. Shevchenko, Int. J. Mod. Phys. A **9**, 1929 (1994).

2. H. Kleinert, Phys. Rev. D **57**, 2264 (1998)

3. M. Lizaire, et al., Phys. Rev. B. **104**, 014515 (2021).

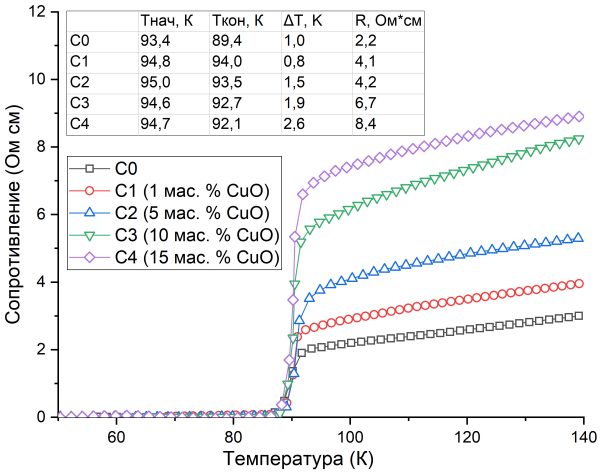
4. D.K. Singh, et al., Phys. Rev. B **105**, 054501 (2022).

Характеристики проводимости композиционных материалов высокотемпературный сверхпроводник YBCO — нановолокна CuO

Л.Ю. Федоров[1,2]*, А.В. Ушаков[1,2], И.В. Карпов[1,2]

[1]ФИЦ Красноярский научный центр СО РАН, Красноярск, Россия
[2]Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия
*e–mail: 1401-87@mail.ru

Введение наноразмерных добавок неорганических материалов в матрицу купратного сверхпроводника является эффективным путем создания искусственных центров пиннинга [1]. Благодаря этому достигается увеличение транспортных характеристик ВТСП за счет воспрепятствования свободному перемещению магнитных вихрей, приводящему к диссипации энергии [2]. При этом важна инертность вводимых примесей по отношению к сверхпроводящей матрице. Добавки не должны понижать критическую температуру исходного сверхпроводника. Существуют предпосылки синергетического эффекта при добавлении нановолокон CuO в сверхпроводник YBCO. Формируется более плотная керамическая матрица с меньшей пористостью, чем достигается большая связность зерен сверхпроводника и повышается плотность критического тока.



	Тнач, К	Ткон, К	ΔT, К	R, Ом*см
C0	93,4	89,4	1,0	2,2
C1	94,8	94,0	0,8	4,1
C2	95,0	93,5	1,5	4,2
C3	94,6	92,7	1,9	6,7
C4	94,7	92,1	2,6	8,4

Рис. 1. Температурная зависимость электросопротивления образцов композитов при нулевом приложенном поле. В таблице: сопротивление при комнатной температуре, ширина перехода и значения температуры перехода.

Важной задачей при исследовании новых композиционных составов является установление влияния различных концентраций нановолокон CuO на температуру перехода системы в сверхпроводящее состояние. На рисунке 1 показаны результаты измерений электрического сопротивления на постоянном токе в диапазоне температур 140-50 К. Как видно из рисунка, все образцы демонстрируют сверхпроводящий переход к нулевому сопротивлению и металлическое поведение выше температуры перехода.

Значения температуры перехода при нулевом приложенном поле для всех образцов приведены в таблице. Образец C1 показал наибольшее значение начальной температуры падения сопротивления. Заметное увеличение Tc может быть связано с привлечением плотности дырок и возможным изменением колебаний решетки YBCO при замещении ионов Cu ионами CuO. При избыточном содержании CuO температура перехода образцов снижается. Как видно из таблицы, значение ширины перехода (ΔT_c) для образца C0 больше, чем для образца C1. Это может быть связано с модифицирующим действием добавки CuO на границы зерен. Более резкие переходы сопровождаются более высокой критической температурой. Однако значения ΔT_c образцов увеличивается с увеличением количества добавки CuO. Что связано как с увеличением пористости, удельного сопротивления границ зерен, так и из-за слабых связей в кристаллической структуре.

Работа выполнена в рамках госзадания ES-2021-0026.

1. И.В. Карпов, А.В. Ушаков, Л.Ю. Федоров *и др.*, Материаловедение **3**, 32 (2021).
2. T. Tchabukiani, D. Daraselia, D. Japaridze *et al.*, J of Supercond. and Novel Magnetism **32**, 3121 (2019).

Оптика и спектроскопия

Люминесцентные свойства легированных боратов с антицеолитной структурой

Т.Б. Беккер

Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия
e–mail: t.b.bekker@gmail.com

В настоящее время бораты являются не имеющими альтернативы кристаллическими средами для нелинейно-оптического преобразования лазерного излучения в область ближнего и вакуумного ультрафиолета, являются основными компонентами поляризационной оптики УФ диапазона [1]. Связано это с удачным сочетанием свойств, а именно, широким диапазоном прозрачности, высоким порогом интенсивности разрушающего излучения, двулучепреломлением, приемлемыми значениями нелинейно-оптических коэффициентов. Относительно новым активно развивающимся направлением является использование кристаллов боратов в качестве матриц для создания светодиодов белого света. Люминофоры на кристаллах боратов характеризуются высоким индексом цветопередачи, хорошей воспроизводимостью цвета, низкой коррелированной цветовой температурой.

В 2017 году открыт новый класс фторидоборатов с антицеолитной структурой, сложенной пористым $[Ba_{12}(BO_3)_6]^{6+}$ каркасом и располагающимися в каналах каркаса гостевыми анионными группами [2]. Последние являются эффективным инструментом кристаллохимического дизайна функциональных боратов.

С целью получения люминофоров белого света в пределах одной матрицы проведена серия экспериментов по легированию кристаллов с $[Ba_{12}(BO_3)_6]^{6+}$ каркасом, $LiBa_{12}(BO_3)_7F_4$ (LBBF), редкоземельными элементами, Ce^{3+}, Tb^{3+} и Eu^{3+} [3,4]. Легированные кристаллы выращивали из высокотемпературных растворов в диапазоне температур 750 – 820°C. Для определения позиции редкоземельного элемента, расшифрована структура кристалла $LiBa_{12}(BO_3)_7F_4$:Eu^{3+} ($P4_2/mbc$, $a = 13.5360(2)$ Å, $c = 14.9439(2)$ Å). Установлено, что европий изоморфно замещает атомы бария согласно схеме $3Ba^{2+} \leftarrow 2Eu^{3+} + \square$, где $\square$ — катионная вакансия [4].

Исследованы спектры люминесценции и возбуждения люминесценции легированных редкоземельными элементами кристаллов LBBF в диапазоне температур 77 – 300 К. Форма и положение линий в спектрах типичны для ионов церия, тербия и европия. Измерены времена затухания люминесценции в диапазоне температур 77 – 300 К. С целью выявления влияния церия на люминесцентные свойства, проведен сравнительный анализ свойств кристаллов LBBF:Eu^{3+}, Tb^{3+}, Ce^{3+} и LBBF:Eu^{3+}, Tb^{3+}, выращенных из высокотемпературных растворов, содержащих идентичные концентрации европия и тербия. Результаты показывают, что люминофоры на основе легированных редкоземельными элементами кристаллов $LiBa_{12}(BO_3)_7F_4$ перспективны для преобразования излучения УФ светодиодов в белый свет. Установлено, что при длине волны возбуждения 370 нм при 300 К кристаллы $LiBa_{12}(BO_3)_7F_4$:Eu^{3+}, Tb^{3+}, Ce^{3+} характеризуются люминесценцией, близкой к дневному свету с координатами цветности CIE и коррелированной цветовой температурой (0,295; 0,362) и 7121 К, соответственно.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-19-00097.

1. M. Mutailipu *et al.*, Chem. Rev. **121** (3), 1130 (2021).
2. T.B. Bekker *et al.*, Inorg. Chem. **56**, 5411 (2017).
3. T.B. Bekker *et al.*, J. Alloys. Comp. **900**, 5163343 (2022).
4. A.A. Ryadun *et al.*, Cryst. Growth. Des. (2022) (in press).

Параметры энергетического распределения ловушек в дозиметрических керамиках $Al_2O_3 - BeO$

М.Ф. Герасимов*, С.В. Никифоров, Д.В. Ананченко, Т.В. Штанг

Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: gerasimow2001@mail.ru

В настоящее время высокодозные ионизирующие излучения (более 10 Гр) широко применяются в радиационных технологиях и научных исследованиях. Для их регистрации перспективным является использование термолюминесценции (ТЛ) наноструктурированных люминофоров с повышенной радиационной стойкостью. Одним из таких материалов является ультрадисперсная керамика на основе Al_2O_3-BeO.

Ранее при исследовании ТЛ данного материала были получены доказательства присутствия энергетического распределения ловушек, соответствующих дозиметрическому пику при 520 К. Наличие указанного распределения было доказано методами начального подъема, $T_m - T_{stop}$ и анализом кривых изотермического затухания ТЛ [1,2]. Вместе с тем, математическое описание закона распределения ловушек по энергиям активации остается невыясненным, что требует дальнейших исследований ТЛ свойств данного материала.

Цель работы: получить параметры и математически описать закон энергетического распределения центров захвата в дозиметрических керамиках Al_2O_3-BeO.

Исследовались образцы керамик Al_2O_3-BeO в виде таблеток (диаметром 5 мм, толщиной 1 мм), полученных путем холодного одноосного прессования нанопорошка α-Al_2O_3 (размер частиц: $75 - 200$ нм) и последующего их отжига в электровакуумной печи (температура 1400°C, 4 часа) в тиглях из оксида бериллия. ТЛ возбуждалась ускорителем «РАДАН ЭКСПЕРТ» (энергия электронов 130 кэВ, доза облучения 15 кГр). ТЛ измерялась с помощью ФЭУ-142 (спектральная чувствительность: $112 - 400$ нм).

Для получения закона энергетического распределения использовалась методика, заключающаяся в последовательном вычитании светосумм кривых ТЛ, измеренных при различной величине T_{stop}. При этом полученные разности светосумм являлись мерой относительных концентраций ловушек, соответствующих разным энергиям активации [3]. Установлено, что полученный экспериментально закон распределения ловушек хорошо описывается экспоненциальной функцией:

$$N(E) = N_0 \exp\left(\frac{E - E_t}{\sigma}\right) \tag{1}$$

где E_t и σ — константы, описывающие положение и ширину распределения (1.07 эВ и 0.10 эВ, соответственно), N_0 — нормировочный множитель. Полученный закон использовался для моделирования кривых изотермического затухания ТЛ путем решения систем дифференциальных кинетических уравнений для всех стадий формирования ТЛ отклика (возбуждения, релаксации и термостимуляции). Установлено, что учет найденных параметров распределения ловушек при моделировании объясняет ранее обнаруженный в экспериментах аномальный эффект поведения кривых изотермического затухания ТЛ [1], заключающийся в уменьшении скорости затухания с ростом температуры. В работе обсуждается влияние параметров распределения ловушек на особенности изотермического затухания ТЛ исследуемых керамик.

1. S.V. Nikiforov, M.F. Gerasimov *et al.*, Radiat. Meas. **153**, 106752 (2022).

2. S.V. Nikiforov, I.G. Avdyushin *et al.*, Appl. Radiat. Isot. **141**, 15 (2018).

3. K. Van den Eeckhout, A. J. Bos *et al.*, Phys. Rev. B **87**, 045126 (2013).

Люминесцентные свойства коллоидных квантовых точек сульфида серебра в присутствии плазмонных наностержней золота

И.Г. Гревцева*, Е.А. Возгорькова, М.С. Асташкина, В.Н. Дерепко, А.А. Брюханов

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
*e–mail: grevtseva_ig@inbox.ru

Вопросы управления люминесцентными свойствами коллоидных квантовых точек (КТ) и гибридных структур на их основе является перспективным направлением для решения ряда фундаментальных и научно-прикладных задач в разных отраслях науки: биологии, химии, оптоэлектронике, квантовой сенсорике и т.д. [1,2].

В данной работе представлены результаты исследования люминесцентных свойств КТ Ag_2S (средним размером 2.6 нм) в присутствии плазмонных наностержней Au (НСт Au) со средним значением длины 45 нм и ширины 9 нм. Структурные свойства компонентов обеспечивали спектральный резонанс пика плазмонного резонанса НСт Au и полосы люминесценции КТ Ag_2S (рис. 1).

Расстояние между компонентами плазмон-экситонной смеси варьировалось путем введения различной концентрации полимера (инертной фотографической желатины), обеспечивающего расстояние между компонентами порядка 5, 25 и 50 нм, соответственно. Показано, что при смешивании компонентов в отсутствии полимера, и при его концентрации, обеспечивающей расстояние между компонентами смеси ~ 5 нм наблюдалось тушение интенсивности люминесценции КТ Ag_2S (рис. 1), что может быть обусловлено фотопереносом носителей заряда. При пространственном разделении компонентов смеси ~ 25 нм, наблюдалось увеличение интенсивности люминесценции в 2 раза с одновременным уменьшением ее времени жизни, что может являться проявлением эффекта Перселла (рис. 1). Увеличение расстояния между компонентами смеси до 50 нм не приводит к заметным изменениям в спектре люминесценции КТ Ag_2S (рис. 1).

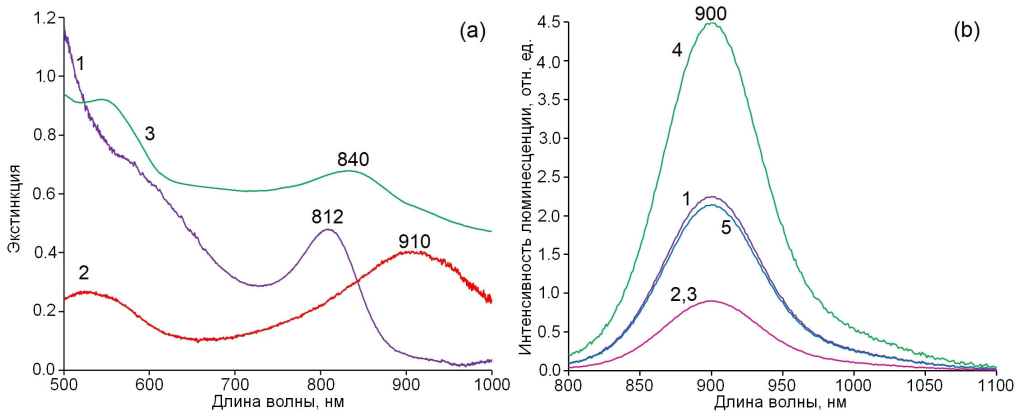


Рис. 1. (a) Спектры экстинкции КТ Ag_2S (1), НСт Au (2) и их смесей (3). (b) Спектры люминесценции КТ Ag_2S (1) и их смесей с НСт Au в отсутствии полимера (2) и при его концентрации обеспечивающей расстояние между компонентами смеси 5 нм (3), 25 нм (4) и 50 нм (5).

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МК-3746.2022.1.2

1. G. Hong *et al.*, Nature Biomedical Engineering **1**, 1, (2017).
2. O.E. Semonin *et al.*, Materialstoda **15**, 508, (2012).

Люминесцентные свойства коллоидных квантовых точек PbS, пассивированных молекулами 2-меркаптопропионовой кислоты

И.Г. Гревцева*, С.В. Бормусова, К.А. Сорокина, К.С. Чирков, Е.А. Возгорькова

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
*e–mail: grevtseva_ig@inbox.ru

Полупроводниковые коллоидные квантовые точки сульфида свинца (КТ PbS) обладают размерно-зависимыми люминесцентными свойствами в ближней и средней ИК областях, что делает их перспективными материалами для создания на их основе устройств для биомедицинских, химических, информационных технологий и т.д. [1,2].

В данной работе рассмотрены результаты исследований люминесцентных свойств коллоидных КТ PbS, пассивированных молекулами 2-меркаптопропионовой кислоты (КТ PbS/2-MPA) средними размерами 3.5 ± 0.5 нм, 4.0 ± 0.5 нм и 4.5 ± 0.5 нм. Обнаружено, что при уменьшении среднего размера КТ PbS/2-MPA в образце от 4.5 нм до 3.5 нм пик люминесценции смещается от 1300 нм к 1090 нм. Отметим, что полосы люминесценции не симметричны и имеют особенность в длинноволновой части спектра. При этом спектры поглощения не имеют экситонной структуры и для всех образцов заметное поглощение начинается в области длин волн менее 1300 нм (0.95 эВ). Таким образом, край поглощения для КТ PbS/2-MPA оказывается смещён в сторону меньших длин волн относительно края поглощения массивного PbS, расположенного в области $\sim$ 3025 нм (0.41 эВ) [3], что является проявлением квантового-размерного эффекта. Характерный для исследуемых образцов бесструктурный край поглощения может быть обусловлен высокой концентрацией дефектов, определяющих примесное поглощение, которое может быть сопоставимо по интенсивности с экситонным поглощением, а также заметной дисперсией по размеру КТ в ансамбле. Для установления стоксова сдвига для исследуемых образцов КТ PbS/2-MPA использовали спектры возбуждения люминесценции. В отличие от спектров поглощения, которые определяются поглощением каждого нанокристалла в образце, в формировании спектров возбуждения участвуют только те КТ, которые излучают на длине волны регистрации свечения. Таким образом, изменяя длину волны регистрации свечения, в спектрах возбуждения люминесценции можно добиться селективности. В спектре возбуждения люминесценции в максимуме полосы 1090 нм (1180 и 1300 нм) наблюдается особенность с пиком при 990 нм (1100 и 1200 нм, соответственно). Положение и форма этого пика позволяет его связать с поглощением основного экситонного состояния в КТ. В таком случае, стоксов сдвиг пика люминесценции относительно пика экситонного поглощения составляет величину 0.116 эВ (0.079 и 0.081 эВ, соответственно). Эта величина характерна для экситонной люминесценции КТ PbS/2-MPA со средним размером около $3 - 5$ нм. В спектрах возбуждения люминесценции в области длинноволнового края полосы свечения для всех образцов КТ PbS/2-MPA отсутствует экситонный пик, а его красная граница смещена в более коротковолновую сторону, что обеспечивает стоксов сдвиг $\sim$ 0.3 эВ. Это позволяет связать длинноволновую особенность в спектре люминесценции КТ PbS/2-MPA с излучательной рекомбинацией носителей заряда на локализованных состояниях.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-00098

1. Chen F. *et al.*, Material Chemistry Frontires **4**, 1340 (2020).

2. Peng Y. *et al.*, Journal of Alloys and Compounds **739**, 345 (2018).

3. L.-D. Zhao *et al.*, J. Am. Chem. Soc **134**, 7902 (2012)

Гамма-резонансный фазовый анализ горных пород регионов России

М.М. Гусейнов
Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e–mail: gusmagm@yandex.ru

Методом ядерной гамма-резонансной спектроскопии (ЯГРС) с целью проверки обоснованности гипотезы о космическом происхождении железа нами исследованы боле 100 разных по морфологии горные породы и речные отложения, собранные с разных территорий планеты, в которых обнаружено железо в составе разных оксидов.

В исследованиях геологов и астрофизиков все чаще находит подтверждение гипотеза о космическом происхождении железа. Особое внимание при этом геологи уделяют поиску железа, как элемента, составляющего почти 40% состава Земли [1,2]. Исследования астрофизиков также показывают, что железо в составе метеоритов, астероидов и космической пыли миллиарды лет назад попали на Солнце и его планеты из космоса [2,3]. В данной работе, исследованы образцы горных пород с разных территорий России, определены основные параметры спектров ядер ^{57}Fe в них, проведён фазовый анализ их минерального состава. Измерения проведены на спектрометре МС-1104Ем, источником гамма-излучения служил ^{57}Co(Cr). Расшифровка спектров проведена программой UnivemMS. По данным изомерных сдвигов валентность Fe в образцах соответствует всем возможным валентным состояниям железа в оксидах.

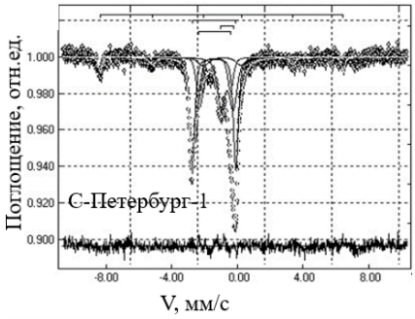


Рис. 1. Пример модельной расшифровки спектра ядер ^{57}Fe в образце горной породы «С-Петербург-1»

Образец	Is, мм/с	Qs, мм/с	Hn, КЭ	S, %
Агвали-11	0.3152	0.5771		50.59
Астрахань-1	1.2676	2.3558		43.56
Ашагасталь-1	1.1222	2.6547		37.86
Красноярск-1	-0.4575	1.1579	379.21	41.33
Москва	0.2705	0.7561		94.86
Ростов-наДону-1	1.6978	1.5751		4.01
Санкт-Петербург	-1.4205	2.6540	459.54	42.21
Туапсе	1.3109	2.3829	448.16	100.00
Хабаровск	1.2125	2.2876		58.82
Чечня	1.1375	2.6476		33.36

Рис. 2. Параметры ЯГР-спектров.

Образец	Минерал	Содержание , %
Агвали-1 (Дагестан)	FeOOH+FeOnH Fe_2O_3 Fe_3O_4	97.7 +/- 2.3 0.5 +/- 0.5 1.9 +/- 1.9
Астрахань-1	FeOOH+FeOnH Fe3O4 Fe	71.8 +/- 0.7 14.5 +/- 2.2 13.7 +/- 1.4
Ашагасталь-1 (Дагестан)	FeOOH+FeOnH Fe_2O_3	89.0 +/-11.0 11.0 +/-11.0
Красноярск-1	FeOOH+FeOnH Fe_3O_4 Fe FeO	69.0 +/- 7.3 6.7 +/- 6.7 3.2 +/- 3.2 21.0 +/- 2.7
Москва	FeOOH+FeOnH Fe_2O_3 Fe_3O_4 Fe FeO	92.1 +/- 7.9 1.6 +/- 1.6 3.2 +/- 3.2 1.2 +/- 1.2 1.9 +/- 1.9
Ростов-наДону-1	Fe_2O_3 Fe_3O_4	64.9 +/- 0.7 35.1 +/- 0.7
Санкт-Петербург	FeOOH+FeOnH Fe_3O_4	83.3 +/-16.7 16.7 +/-16.7
Туапсе	FeOOH+FeOnH Fe_3O_4	94.6 +/- 5.4 11.0 +/-11
Хабаровск	FeOOH+FeOnH Fe_3O_4	45.1 +/- 0.2 54.9 +/- 0.2
Чечня	FeOOH+FeOnH Fe_3O_4 Fe	80.0 +/-20.0 19.5 +/-19.5 0.5 +/- 0.5

Рис. 3. Фазовый состав образцов.

1. Д.М. Печерский, Земля и Вселенная **6**, 68 (2010).
2. Н.А. Мезенин, Занимательно о железе. — Москва: Металлургия (1977).
3. P. Tarakeshwar, P.R. Buseck, and F.X. Timmes, The Astrophysical Journal **879**, 2 (2019).

Дефект упаковки в структуре кристаллов ниобата лития двойного легирования

А.В. Кадетова[1]*, О.В. Токко[2], А.И. Прусский[2], М.Н. Палатников[1]

[1]Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева, Апатиты, Россия

[2]Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

*e–mail: ttyc9@mail.ru

Кристаллы $LiNbO_3$ являются функциональной средой для обработки сигналов [1]. Одним из основных путей получения кристаллов с заданными физико-химическими свойствами является легирование различными элементами. Структура кристаллов допускает двойное легирование, каждая примесь при вхождении в решётку вносит свой вклад в структурное состояние кристалла, что отражается на свойствах получаемых материалов [2].

В данной работе исследовались образцы $LiNbO_3$:Zn:Mg (с концентрациями легирующих элементов [Zn] = 4.5 и [Mg] = 0.9 мол.%, [Zn] = 3.9 и [Mg] = 1 мол.%), полученные методом гомогенного легирования. Образцы для исследования в форме порошка были предоставлены лабораторией материалов электронной техники ИХТРЭМС КНЦ РАН.

Для данных образцов были получены дифракционные картины на дифрактометре ДРОН-6 в CuKα-излучении. Качественный фазовый анализ показал, что дифракционные картины соответствовали рентгенограмме $LiNbO_3$ с пространственной группой симметрии $R3c$, но в области углов рассеяния от 11 до 22° наблюдались слабые дополнительные отражения, которые запрещены пространственной группой симметрии $R3c$ (рис. 1а).

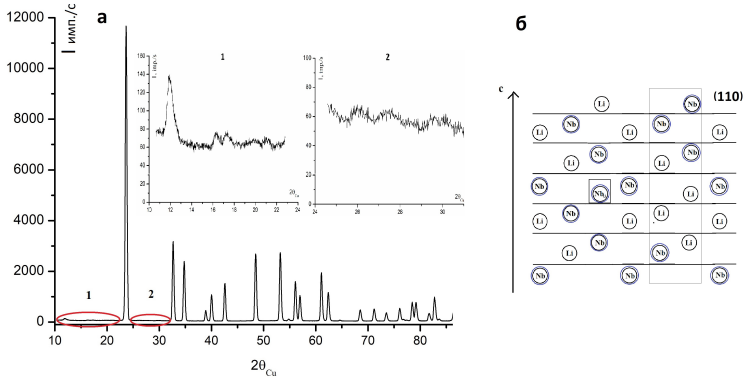


Рис. 1. а) Рентгенограмма $LiNbO_3$:Zn:Mg (3.9:1 мол.%) и области (1,2) с дополнительными линиями; б) расположение катионов на плоскости (110) в удвоенной ячейке $a' = 2a$, $c' = c$ $LiNbO_3$.

В процессе индицирования, включая слабые дополнительные линии, рентгенограммы были проиндицированы в гексагональной сингонии с вдвое увеличенным периодом a: $a' = 2a$, $c' = c$, что указывает на образование сверхструктуры в образцах. Моделирование сверхструктуры проводилось путём замены нормального порядка чередования катионов в кислородных цепочках, характерного для структуры $LiNbO_3$, на ильменитоподобный. Рассчитанные для модели кривые интенсивности рассеяния сравнивались с экспериментом. Наилучшее совпадение кривых наблюдалось, когда в удвоенной ячейке $a' = 2a$, $c' = c$ на плоскости (110) образуется дефект упаковки по типу ильменита (рис. 1б).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20114 (https://rscf.ru/project/22-22-20114/), проводимого совместно с Республикой Карелия с финансированием из Фонда венчурных инвестиций Республики Карелия (ФВИ РК).

1. А.В. Сюй *и др.*, Журнал технической физики **5**, 109 (2013).

2. O. Sánchez-Dena, Crystals **10**, 990 (2020).

Детектор рентгеновского излучения на основе микроканальных пластин

И.Э. Кантур[1]*, Ю.М. Ярмошенко[1], В.Е. Долгих[1], Т.В. Кузнецова[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: il.kantur@mail.ru

При изучении рентгеновского излучения часто возникает проблема регистрации спектрального распределения низкой интенсивности с подходящей статистикой и пространственным разрешением. В стандартных лабораторных источниках рентгеновского излучения, маломощных по сравнению с синхротронными, помимо детекторов рентгеновского излучения на основе полупроводниковых технологий, используются двумерные детекторы на основе микроканальных пластин (МКП). Они имеют ряд преимуществ при работе в лабораторных условиях, поскольку обладают высоким пространственным разрешением и эффективностью, большим временем эксплуатации при малой мощности рентгеновского излучения и относительно недороги. В настоящей работе представлена система регистрации рентгеновского излучения, которая состоит из детектора, содержащего две микроканальные пластины (МКП), оптического объектива и цифровой видеокамеры. На рентгеновском флуоресцентном спектрометре с изогнутым кристаллом кварца и горизонтальной фокусировкой методом Иоганна получены изображения $K_{\alpha 1,2}$-, $K_{\beta 1,5}$-спектров Ca, Ti, Mn, Fe, Co. Измерения выполнены с использованием детекторов с коэффициентами усиления 10^6, 10^7 и двух видеокамер, имеющих разные характеристики и размер пикселей. Измерение спектров продублировано на одномерном позиционном детекторе. Улучшение качества МКП и использование камеры с достаточной светочувствительностью и наличием активного охлаждения, а также оптимизация программных алгоритмов фильтрации [1] может существенно улучшить качество регистрации спектров.

Достигнута высокая скорость измерений спектров с приемлемой статистикой. Проведенные эксперименты демонстрируют эффективность применения детекторов на основе микроканальных пластин (МКП) для регистрации рентгеновских спектров в сравнении с одномерным позиционным детектором. В среднем время накопления спектров с одинаковой статистикой сократилось в 100 раз.

Работа выполнена в рамках гос. заданий МИНОБРНАУКИ России (темы «Спин» Г.р. № 122021000036-3, «Электрон» Г.р. № 122021000039-4) и при частичной финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 20-02-00541.

1. СВИДЕТЕЛЬСТВО о государственной регистрации программы для ЭВМ N 2022660528 VISUAL PHOTONS, Правообладатель: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН), Авторы: Кантур И.Э., Долгих В.Е., Ярмошенко Ю. М., Кузнецова Т.В.

Влияние облучения электронами с энергией 10 МэВ на электронные свойства монокристаллов $\alpha - In_2Se_3$

А.Д. Лобанов[1]*, Ю.В. Корх[1], Е.И. Патраков[1], М.Н. Сарычев[2], В.Ю. Иванов[2], Т.В. Кузнецова[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: lobaleks1999@mail.ru

Селенид индия (In_2Se_3) привлекает большое внимание благодаря своим необычным электронным свойствам [1]. In_2Se_3 имеет широкое применение в фотогальванических устройствах. Гетероструктуры $In_2Se_3/MoS_2/In_2Se_3$ перспективны для создания настраиваемых фотокаталитических материалов [2]. Наноструктурные соединения In_2Se_3 нашли широкое применение в электронике, оптоэлектронике, а также в качестве термоэлектриков [3].

В большинстве материалов при облучении электронами больших энергий наблюдается деградация электрических характеристик. Различные устройства, в которых может использоваться In_2Se_3, работают в условиях космоса. На работоспособность устройств в данных условиях большое влияние оказывает ионизирующее излучение. В связи с этим, особое значение имеет исследование влияния облучения ускоренными частицами на электронные свойства In_2Se_3, исследование его радиационной стойкости.

В работе исследованы монокристаллы In_2Se_3, выращенные вертикальным методом Бриджмена. Проведён рентгенофазовый анализ монокристаллов. Подтверждено, что исследуемые монокристаллы являются представителями фазы α-In_2Se_3.

Необлученные монокристаллы α-In_2Se_3 исследовались методами энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDX) и сканирующей электронной микроскопии (SEM). На поверхности были обнаружены круглые образования, размер которых примерно 200-500 нм. Предположительно данные объекты являются соединением $InSe_2$. Монокристаллы In_2Se_3 были облучены электронами с энергией 10 МэВ, флюенсы электронов 10^{15} см$^{-2}$, 10^{16} см$^{-2}$, 10^{17} см$^{-2}$. В работе применялись 2 метода атомно-силовой микроскопии: токовая спектроскопия и метод зонда Кельвина. Методом токовой спектроскопии измерены вольтамперные характеристики на круглых образованиях и за их пределами до и после облучения различными электронными флюенсами. Методом зонда Кельвина получены распределения поверхностных потенциалов до и после облучения различными электронными флюенсами.

После электронного облучения происходит увеличение локального сопротивления вне круглых объектов. На круглых образованиях после облучения электронным флюенсом 10^{15} см$^{-2}$ происходит уменьшение сопротивления. После дальнейшего облучения электронным флюенсом 10^{17} см$^{-2}$ происходит значительное увеличение сопротивления как на круглых образованиях, так и за их пределами. После электронного облучения распределение поверхностных потенциалов становится более однородным.

Авторы работы выражают благодарность Бондарю И.В. за предоставленные образцы α-In_2Se_3.

1. H. Long *et al.*, Nanotechnology **46**, 465704 (2019).
2. L. Zhang *et al.*, Front. of Phys **6**, 63504 (2020).
3. J. Li *et al.*, ACS Nano **15**, 18683 (2021).

Влияние облучения высокоэнергетическими электронами на электронную структуру CaF_2 по данным рентгеновской эмиссионной спектроскопии

С.А. Маслова[1]*, Ю.М. Ярмошенко[1], А.Е. Ангервакс[2], А.И. Рыскин[2], В.Ю. Иванов[3], Т.В. Кузнецова[1,3]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
[3]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: serafimamaslova@mail.ru

Монокристаллы CaF_2 является распространенным материалом для получения, обработки и хранения информации в лазерной оптике [1]. Для расширения оптического диапазона работы и оптимизации свойств кристаллов используются различные методы модификации кристаллической структуры. Одним из способов образования коллоидов в ионных кристаллах является радиационное окрашивание под воздействием пучков электронов. За последние десятилетия можно выделить всего несколько работ, в которых описаны результаты изучения электронной структуры тонких плёнок CaF_2, окрашенного под действием облучения электронами и методами фотоэмиссионной спектроскопии [2,3]. Это связано с экспериментальными препятствиями, в том числе с большой энергетической щелью, которая не позволяет в полной мере применить метод компенсации заряда, возникающего в объёме образца при эмиссии электронов под действием падающего рентгеновского излучения.

В данной работе изучены рентгеновские эмиссионные спектры (XES) до и после облучения образцов монокристаллов Ca. Монокристаллы были подвержены облучению электронами с энергией 10 МэВ в течение $12-48$ часов.

По данным XES, $K\beta_5$ спектры кальция состоят из двух полос, одна из которых отображает собственные $Ca4p3d4s$ состояния, другая мощная полоса отражает примесные $F2p$ и $Ca4p4s$ состояния. Появление второй полосы в $K\beta_5$ спектре кальция объясняется ковалентным вкладом в химическую связь атомов Ca с дефектами H типа по F-подрешётке. После удаления слоя поверхности толщиной ≈ 100 мкм содержание фазы с аномальным содержанием фтора резко уменьшается.

На основании проведенных исследований установлено, что облучение электронами с энергией 10 МэВ массивных монокристаллов CaF_2 приводит к образованию дефектов по F-подрешётке. Экспериментально по данным рентгеновской эмиссионной спектроскопии наблюдается большой ковалентный вклад в химическую связь Ca—F.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Спин» Г.р. № 122021000036-3).

1. A.S. Shcheulin *et al*, Opt. Spectrosc. **118**, 542 (2015).

2. S. Rix *et al*, Appl. Phys. Lett. **99**, 261909 (2011).

3. Eli Rotenberg, J.D. Denlinger, A. Marjorie, Appl. Phys. Lett. B **53**, 1584 (1996).

Влияние тетра-координации интеркалированной меди в Cu_xZrSe_2 на его электронную структуру

А.С. Шкварин[1,2], А.И. Меренцов*[1], М.С. Постников[1,2], А.Н. Титов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия
*e–mail: alexander.merentsov@urfu.ru

Исследования мультиферроиков вызвали огромный научный интерес к материалам, в которых одновременно с магнитным возникает сегнето-электрический порядок. Повышение температуры упорядочения и усиление взаимодействия между электрической и магнитной подсистемами могут сделать эти материалы перспективными для практического применения. Нами был обнаружен аналог мультиферроика $CuCrSe_2$ — $CuZrSe_2$, в котором медь распределена по тетраэдрическим позициям так же, как и в $CuCrX_2$. Структура такого материала аналогична структуре делафосита ($CuCrO_2$) и может быть описана как решетка, состоящая из слоев MX_2 (M = Cr, Zr; X = S, Se), интеркалированных медью. В низкотемпературной фазе $CuCrX_2$ отсутствует центр симметрии, и она демонстрирует сегнетоэлектрическое упорядочение. Основная проблема в том, что температура перехода довольно низкая — для $CuCrSe_2$ она составляет около 50 К. Предположительно температуру перехода можно повысить замещением в подрешетке Cr. Однако все предыдущие попытки, предпринятые в этом направлении, привели к потере самого ценного свойства — нецентросимметричности решетки. Причиной этого является перераспределение атомов Cu из тетраэдрических позиций в октаэдрические, расположенные в центре симметрии элементарной ячейки. Кристаллическая структура Cu_xZrSe_2 в свою очередь при концентрациях меди более 0.4 располагает атомы меди в тетраэдрических позициях. Ранее мы подробно исследовали электронную и кристаллическую структуру совместно с физическими свойствами системы Cu_xZrSe_2 в концентрационном диапазоне $0 \leqslant x \leqslant 0.3$ [1,2]. В данной работе мы исследуем электронную структуру соединения $Cu_{0.5}ZrSe_2$ методами XPS (x-ray photoelectron spectroscopy), ResPES (resonant x-ray photoelectron spectroscopy) и XAS (x-ray absorption spectroscopy).

Спектры валентной зоны и спектры остовных уровней демонстрируют изменение формы и энергетического положения, что объясняется тетра-координацией атомов меди в $Cu_{0.5}ZrSe_2$. Показано, что при тетра-координации меди характер химической связи является ионным и связан с переносом заряда от меди на $ZrSe_2$. Не обнаружено следов $Ti3d/Cu3d$-гибридизации, характерной для химической связи интеркаланта с решёткой в случае октакоординации интеркаланта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00361).

1. A.S. Shkvarin *et al.*, J. Mater. Chem. C. **24**, 8290 (2020).
2. A.S. Shkvarin *et al.*, J. Phys. Chem. C. **123**, 410 (2019).

Преобразование дефектов I^0 в I^- в $MAPbI_3$ при легировании Eu^{2+}

А.В. Расметьева[1]*, М.И. Устинова[3], А.И. Кухаренко[1,2], С.О. Чолах[1], П.А. Трошин[3], Э.З. Курмаев[1,2], И.С. Жидков[1,2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия
*e–mail: a.v.rasmetieva@urfu.ru

Металлоорганические перовскиты привлекают все внимание для фотогальванических технологий в связи с их высокой эффективностью, простотой получения, низкой себестоимостью и исключительными оптическими характеристиками [1]. Однако, гибридные галогенидные перовскиты, будучи относительно мягкими ионными твердыми телами, содержат в поликристаллических пленках точечные дефекты. Являясь центрами безызлучательной рекомбинации, они влияют на квантовую эффективность фотолюминесценции и ухудшают фотоэлектрические характеристики. В связи с этим пассивация дефектов является весьма актуальной проблемой, непосредственно связанной с повышением стабильности перовскитных поглощающих солнечных элементов. На сегодняшний день частичное замещение свинца является эффективной стратегией уменьшения количества дефектов, что может повысить стабильность перовскитных солнечных элементов [2]. В настоящей работе мы исследовали влияние легирования Eu на $MAPbI_3$ ($MA = CH_3NH_3$) с помощью рентгеновских фотоэлектронных спектров (РФЭС).

Соотношение I:Pb в исходном образце отличается от стехиометрического, что свидетельствует о наличии дефектов внедрения I^0. Как следует из полученных данных, частичная замена свинца европием увеличивает соотношение I:Pb и при концентрации Eu 10% приводит его к стехиометрическому составу.

Для выяснения причин такого поведения в результате легирования перовскита двухвалентным европием были измерены $3d$-спектры РФЭС Eu. Эти спектры ясно показывают, что при частичном замещении свинца двухвалентным европием в результате взаимодействия появляются ионы трехвалентного европия: $Eu^{2+} + I^0 \rightarrow Eu^{3+} + I^-$. Ранее предлагалось заживление дефекта I^0 частичной заменой свинца трехвалентным европием. В этом случае $I^0 \rightarrow I^-$ конверсия достигалась в результате двухстадийного процесса: $2Eu^{3+} + Pb^0 \rightarrow 2Eu^{2+} + Pb^{2+}$ и $Eu^{2+} + I^0 \rightarrow Eu^{3+} + I^-$ через атомы металлического свинца (Pb^0). Учитывая относительно низкое содержание дефектов Pb^0, предпочтительным представляется прямой метод залечивания дефектов I^0 путем изовалентного замещения $Pb^{2+} \rightarrow Eu^{2+}$. Внедрение межузельного атома йода приводит к большому искажению октаэдра Pb-I, и пассивация таких дефектов должна индуцировать устойчивость подрешетки Pb-I.

Действительно, как показали измерения РФЭС Pb $4f$-спектров, легирование перовскита европием приводит к заметному сужению спектра, что свидетельствует об устранении искажений в подрешетке Pb-I. В этих же спектрах видно незначительное количество дефектов Pb^0, что является дополнительным аргументом в пользу использования легирующей примеси двухвалентного европия. Таким образом наши результаты показывают, что частичная замена свинца двухвалентным европием приводит к конверсии $I^0 \rightarrow I^-$ и устраняет искажений в подрешетке Pb-I.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ для молодых учёных СП-1200-2022.1.

1. J. Berry *et al.*, Adv. Mater. **27**, 5102 (2015).
2. J.W. Wang *et al.*, Energy Environ. Sci. **9**, 2892 (2016).

Электронная структура перовскитов $CH_3NH_3Pb_{1-x}M_xI_3$ (M = Ca, Sr, Ba)

А.В. Расметьева[1]*, И.С. Жидков[1,2], М.И. Устинова[3], П.А. Трошин[3], А.И. Кухаренко[1,2], С.О. Чолах[1], Э.З. Курмаев[1,2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия
*e–mail: a.v.rasmetieva@urfu.ru

В последние годы большое внимание уделяется органо-неорганическим гибридным галогенидным перовскитам как перспективным материалам для фотовольтаики из-за их низкой стоимости, подходящей ширины запрещенной зоны и высокой эффективности преобразования солнечной энергии [1]. Широкому внедрению этих материалов в производство солнечных элементов препятствуют два фактора: ограниченная стабильность и токсичность Pb. Одним из способов снижения токсичности свинца является его замена другими металлическими элементами. Катионы щелочноземельных металлов (Ca, Sr и Ba) являются перспективными кандидатами на замену токсичного Pb в перовските $CH_3NH_3Pb^{2+}I_3$, поскольку они стабильны, доступны и изовалентны (2+), что важно для сохранения баланса заряда. Однако расчеты зонной структуры показали, что полная замена атомов свинца в гибридной решетке перовскита щелочноземельными элементами приводит к значительному увеличению ширины запрещенной зоны до 3 эВ [2], что делает их практически непригодными для использования в качестве легких поглотители в фотогальванических устройствах. В данной работе мы рассматриваем возможность частичного замещения Pb в $CH_3NH_3PbI_3$ Ca, Sr, Ba от 1 до 10% и влияние такого замещения на электронную структуру и рентгенофотоэлектронные спектры (остовные уровни и валентные зоны) допированных гибридных перовскитов.

Измерения РФЭС и постепенное увеличение атомного соотношения I:Pb показали, что атомы металлов естественным образом замещают ионы Pb^{2+} в исследованных перовскитах. Для изучения стабильности связей Pb-I были исследованы РФЭС-спектры Pb $4f_{7/2}$. Из этих данных следует, что до концентрации примеси 5% спектры практически идентичны нелегированному образцу.

РФЭС-измерения в верхней части валентной зоны показывают, что при введении примесей в концентрации 10% энергетическая щель увеличивается незначительно (порядка $0.1 - 0.2$ эВ), что практически не влияет на фотоэлектрические свойства. Таким образом, мы обнаружили, что частичная замена токсичного свинца щелочноземельными добавками сохраняет стабильность органического катиона и связей Pb-I и практически не изменяет энергетическую щель, сохраняя эффективные фотовольтаические свойства.

Комплексные исследования XPS (основные уровни и валентные зоны) подтвердили включение щелочноземельной примеси в решетку перовскита и соответствующие изменения в соотношениях N:Pb и I:Pb. Установлено, что с помощью этих допантов и относительно низкого уровня их концентрации можно снизить содержание токсичного свинца в гибридном перовските при сохранении стабильности органического катиона и химических связей Pb-I, а также фотовольтаических свойств.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ для молодых учёных СП-1200-2022.1.

1. W. Nie *et al.*, Science **10**, 522 (2015).
2. M. Pazoki *et al.*, Phys. Rev. B **93**, 144105 (2016).

Анализ спектров отражения и магнитоотражения феррит-шпинели $MnFe_2O_4$

Е.А. Суржиков[1,2]*, Ю.П. Сухоруков[1], А.В. Телегин[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: surzhikov@imp.uran.ru

Установление корреляции магнитоупругих и магнитооптических (МО) свойств в ферримагнитной обращённой шпинели $CoFe_2O_4$ с большой величиной магнитострикции позволило определить новое направление в физике магнитных явлений — стрейн-магнитооптика [1]. Для лучшего понимания природы стрейн-магнитооптики необходимо детальное изучение особенностей МО свойств других магнитострикционных материалов. Например, нормальная шпинель $MnFe_2O_4$, которая близка по физико-химическим свойствам к $CoFe_2O_4$, но имеет гораздо меньшую величину магнитострикции [2].

Целью работы являлось измерение спектров отражения и обнаружение эффекта магнитоотражения в монокристалле феррит-шпинели $MnFe_2O_4$ в инфракрасном диапазоне длин волн и обработка полученных спектров методом Крамерса-Кронига (КК). Образцы кристаллов, полученные методом зонной плавки, подвергались механической шлифовке и полировке с помощью алмазных паст.

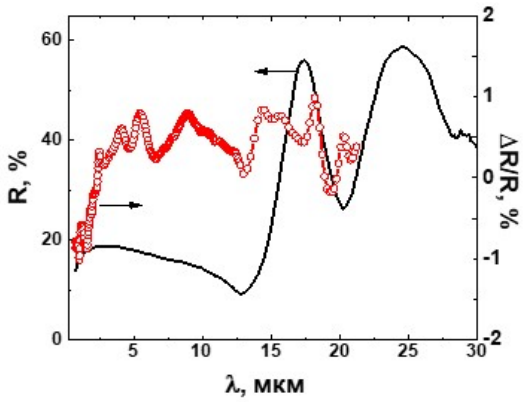


Рис. 1. Спектры отражения R и магнитоотражения $\Delta R/R$ для монокристалла $MnFe_2O_4$ в поле $H\|[100]$.

На рис. 1 приведён спектр отражения R образца монокристалла $MnFe_2O_4$. Спектр R формируется вкладом фононов в области длин волн $\lambda > 14$ мкм, частотно-независимой частью отражения ($R \sim 17\%$) в области $3 < \lambda < 12$ мкм и дисперсионной частью при $\lambda < 2.5$ мкм. Магнитоотражение ($\Delta R/R$) света в $MnFe_2O_4$ (относительное изменение интенсивности отражённого света под действием магнитного поля) было измерено в поле 3 кЭ, вдоль различных кристаллографических осей кристалла и по абсолютной величине не превышает ~ 1 % (рис. 1). Наличие частотно-независимой части в спектре R ($2.5 < \lambda < 8$ мкм) позволило определить показатель преломления $n = 2.4$, величина которого согласуется с известными данными. Анализ спектров R методом КК позволил рассчитать спектр магнитопроводимости (магнитопоглощения) света, величина которого достигает $\sim 5\%$, и магниторефрактивный эффект $\Delta n/n = (n_H - n_0)/n_0 \cdot 100\% \approx +0.02\%$, где n_H, n_0 — показатели преломления в поле и без поля.

В представленной работе показано подобие полевых зависимостей $\Delta R/R$ и магнитострикции. Предполагается, что в $MnFe_2O_4$ имеет место корреляция магнитоупругих и МО свойств, как и в $CoFe_2O_4$ [1]. Появление эффекта $\Delta R/R$ в монокристаллах $MnFe_2O_4$ может быть связано с чувствительностью электронной структуры шпинели к механической деформации решётки в результате приложения внешнего магнитного поля.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Спин» № 122021000036-3).

1. Yu.P. Sukhorukov, A.V. Telegin, N.G. Bebenin *et al.*, J. Appl. Phys. **128**, 195103 (2020).

2. R. M. Bozorth, E. F. Tilden, and A. J.Wiliams, Phys. Rev. **99**, 1788 (1955).

Исследование структурного состояния нелинейно-оптически активных кристаллов $LiNbO_3$ двойного легирования катионами Mg^{2+}, Zn^{2+} рентгенографическими методами

О.В. Токко[1]*, А.В. Кадетова[2], А.И. Прусский[1], М.Н. Палатников[2]

[1]Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия
[2]Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева, Апатиты, Россия
*e–mail: solvak@yandex.ru

Изучение структурного состояния, в частности — механизмов вхождения примесей, а также распределения собственных дефектов в решётке ниобата лития является актуальной задачей, так как в зависимости от характера размещения дефектов существенно меняются функциональные свойства данных материалов [1].

Цель данной работы — установить модель расположения примесных и собственных дефектов в кристаллах $LiNbO_3$:Zn:Mg, полученных по технологии гомогенного легирования. Образцы были предоставлены Институтом химии и технологии редких элементов и минерального сырья имени И.В. Тананаева КНЦ РАН.

Структурные характеристики (координаты атомов, коэффициенты заполнения позиции, параметры теплового движения) исследуемых кристаллов уточнялись методом Ритвельда по данным порошковой дифракции (ДРОН-6, $\lambda_{CuK_\alpha} = 1.54178$ Å), используя предложенные в литературе модели описания дефектной структуры ниобата лития.

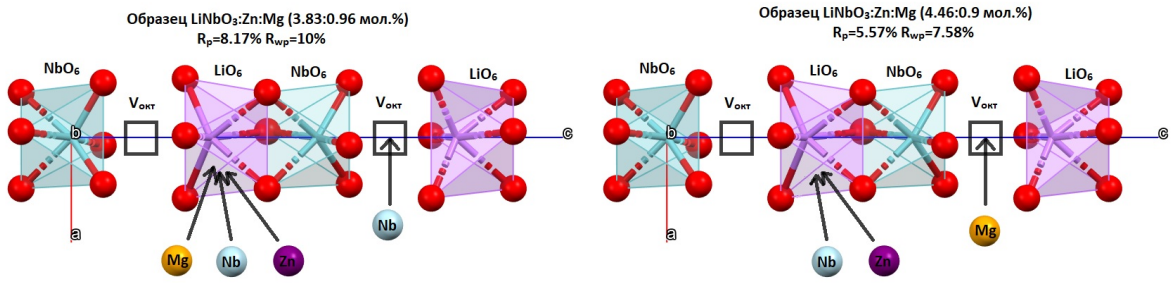


Рис. 1. Расположение примесных и собственных дефектов в кристаллах: а) $LiNbO_3$:Mg:Zn (3.83:0.96 мол.%); б) $LiNbO_3$:Mg:Zn (4.46:0.90 мол.%).

Уточнение вероятностных моделей расположения собственных и примесных дефектов в кристаллах $LiNbO_3$:Mg:Zn методом Ритвельда показали, что Zn занимает LiO_6 октаэдр в структуре кристалла. Концентрация Mg в исследуемых кристаллах практически одинаковая, однако, с увеличением Zn меняется механизм вхождения Mg в кристаллическую решётку. В образце $LiNbO_3$:Zn:Mg (3.83:0.96 мол.%) магний занимает LiO_6 октаэдр, а в образце $LiNbO_3$:Zn:Mg (4.46:0.9 мол.%) магний размещается в пустом октаэдре, при этом исчезает дефект типа Nb_{oct}. Антиструктурный дефект Nb_{Li} наблюдается в обоих образцах. С увеличением концентрации Zn уменьшается количество собственных дефектов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20114 (https://rscf.ru/project/22-22-20114/), проводимого совместно с Республикой Карелия с финансированием из Фонда венчурных инвестиций Республики Карелия (ФВИ РК).

1. M. Aillerie, J. Phys.: Conf. Ser. **416**, 1 (2013).

Кристаллическая и электронная структура Cr_xZrSe_2

А.С. Шкварин[1,2*], А.И. Меренцов[1], М.С. Постников[1,2], Е.Г. Шкварина[1,2], С.В. Пряничников[3], А.М. Лебедев[4], Р.Г. Чумаков[4], А.Н. Титов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия
[3]Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[4]Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
*e–mail: shkvarin@imp.uran.ru

Интеркалатные соединения Cr_xTiX_2, X = S, Se, Te привлекают внимание из-за спиновой поляризации Cr3d-состояний, вызванных внутриатомным взаимодействием Cr2p и 3d-оболочек. Поскольку Cr3d- состояния имеют спиновое расщепление, то возникает возможность получить материал со спиново-поляризованными состояниями на уровне Ферми. Этому, однако, препятствуют два обстоятельства. Во-первых, в исследованных системах Cr_xTiSe_2 и Cr_xTiTe_2 отсутствует щель между валентной зоной, образованной в основном p-состояниями халькогена, и зоной проводимости, образованной тоже в основном Ti3d-состояниями, и спиново-поляризованные состояния находятся при той же энергии, что и неполяризованные X_p-состояния, так что вклад спиново-поляризованных электронов в общую плотность носителей заряда оказывается мал. Во-вторых, увеличение концентрации хрома приводит к уширению спиновых подзон и при достижении порога протекания в подрешётке титана, координированного хромом ($x = 0.25$), перекрытие уже столь велико, что щель между спиновыми подзонами уже не фиксируется. Обе этих проблемы можно решить, используя в качестве решётки-хозяина не TiX_2, а изоструктурные и изовалентные соединения ZrX_2. Удачным решением этой проблемы кажется $ZrSe_2$. Последний материал является полупроводником со щелью между Zr4d-зоной проводимости и Se4p-валентной зоной примерно 1 эВ. Можно ожидать, что состояния хрома будут располагаться в щели между Zr4d и Se4p- состояниями и сохранять спиновую поляризацию до высоких концентраций хрома.

Выполнен синтез системы Cr_xZrSe_2. Для поликристаллических образцов выполнено уточнение кристаллической структуры. Установлено, что хром распределён между окта- и тетраэрически координированными позициями Ван-дер-Ваальсовой щели. Изучены магнитные свойства, выращены монокристаллы. На монокристаллическом образце получены спектры фотоэмиссии, в том числе с резонансным возбуждением, а также спектры поглощения. Анализ результатов указывает на то, что уровень Ферми захватывается зоной спиново-поляризованных Cr3d-состояний, расположенных в щели между Se3p-валентной и Zr4d-зоной проводимости.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-03-00275.

Зонная структура структурных фрагментов в $Zr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$

А.И. Меренцов[1], А.С. Шкварин*[1,2], М.С. Постников[1,2], А.Н. Титов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия
*e–mail: shkvarin@imp.uran.ru

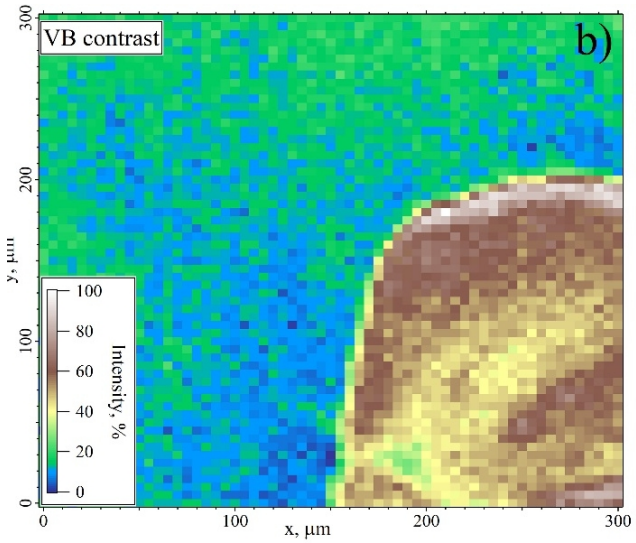


Рис. 1. SPEM изображение поверхности $Zr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$ в контрасте по валентной полосе.

Дихалькогениды переходных металлов представляют собой широкий класс материалов с практически важными и фундаментальными свойствами. Ранее было установлено, что такого типа твердые растворы формируют структурные фрагменты [1,2]. Основной проблемой является небольшой размер этих фрагментов, что значительно затрудняет изучение электронной структуры экспериментальными методами. Система $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ с одной стороны демонстрирует плавное изменение параметров решетки и спектральных данных, с другой стороны поведение проводимости не удается объяснить в рамках однородного твердого раствора. Одним из возможных объяснений такого поведения может служить наличие когерентно связанных структурных фрагментов, между которыми происходит перенос заряда — псевдо-допирование фрагментов «$TiSe_2$» за счет переноса заряда от «$ZrSe_2$». В данном случае под «$TiSe_2$» и «$ZrSe_2$» следует понимать структурные фрагменты на основе матриц $TiSe_2$ и $ZrSe_2$, но не обязательно чистые матрицы. Исследование электронной структуры методами XPS, XAS и ResPES не показали наличия структурных фрагментов в виду относительно большого пучка при получении спектров. Для установления факта наличия структурных фрагментов было выполнено исследование монокристалла $Zr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$. Для исследования электронной и зонной структуры, а также состава поверхности были использованы методы Scanning PhotoElectron Microscopy (SPEM) и nano-Angle Resolved PhotoElectron Spectroscopy (nano-ARPES) на линии ANTARES синхротрона Soleil.

Экспериментально обнаружены структурные фрагменты, имеющую различную электронную и зонную структуры (рис. 1). Выполнено подробное изучение электронной и зонной структуры каждого из типов структурных фрагментов при двух температурах. Показано, что зонная структура меняется незначительно в следствии когерентной связи между структурными фрагментами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-60031.

1. A.N. Titov *et al.*, Chem. Mater. **33**, 8915 (2021).

2. A.I. Merentsov *et al.*, J. Phys. Chem. Solids. **160**, 110309 (2022).

Люминесцентные характеристики керамик Yb:YAG

В.И. Соломонов, А.В. Спирина, А.С. Макарова*

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e–mail: anniebubnova@mail.ru

Данная работа посвящена изучению природы центров люминесценции в керамиках иттрий-алюминиевого граната (Yb:YAG), активированного иттербием, в связи с перспективностью использования керамического материала в качестве активного элемента мощных твердотельных лазеров.

В качестве объектов исследования использовались прозрачные керамические образцы Yb:YAG с содержанием оксида иттербия 5 мол.%.

Данные образцы изучались с помощью импульсной катодолюминесценции (ИКЛ), которую возбуждали и исследовали на установке КЛАВИ [1]. Перед исследованием образцы не подвергали специальной обработке. Облучение керамик осуществлялось электронным пучком длительностью 2 нс при плотности тока 130 А/см^2 и средней энергии электронов 170 кэВ. Регистрация интегральных по времени спектров свечения проводилась с помощью многоканальных фотоприемников. Для изучения кинетики полос люминесценции поток излучения выводился на спектрометрический комплекс на базе монохроматора МДР-41 и фотоумножителей ФЭУ-100 и ФЭУ-62. Сигнал с ФЭУ регистрировался осциллографом Keysight DSOX2014A. Все измерения проводились в воздухе при комнатной температуре образцов.

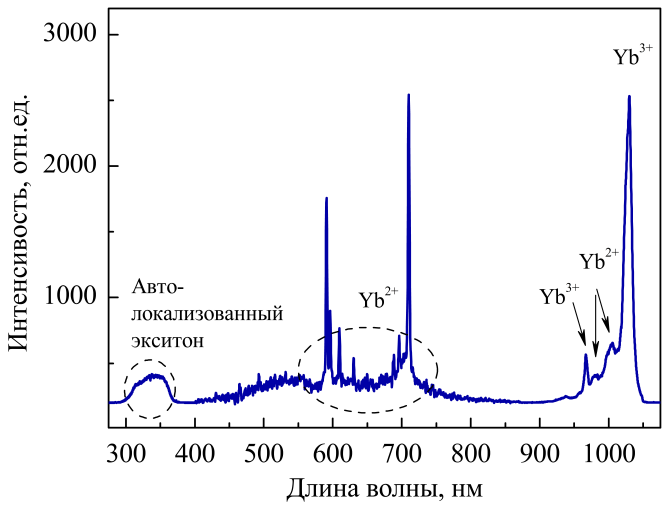


Рис. 1. Обзорный спектр ИКЛ керамических образцов Yb:YAG.

Характерный спектр ИКЛ исследуемых образцов Yb:YAG приведен на рис. 1. В ближнем инфракрасном диапазоне спектра люминесценции присутствуют спектральные линии, соответствующие энергетической структуре иона иттербия Yb^{3+} в иттрий-алюминиевом гранате [2]. Помимо люминесценции ионов Yb^{3+}, в спектрах всех образцов проявляются спектральные линии при 591, 596, 609, 630, 696, 979 и 1005 нм, соответствующие излучению иона Yb^{2+} [3]. Кроме того, в ультрафиолетовой области наблюдается широкая полоса с максимумом при 350 нм собственного дефекта, образованного межузельными ионами Al^{3+} и Y^{3+} [4]. Для всех образцов проведены кинетические исследования идентифицированных полос люминесценции.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, грант № 20-08-00018.

1. V.I. Solomonov *et al.*, Laser Phys. **16**, 126 (2006).

2. А.А. Каминский, Лазерные кристаллы. — М.: Наука (1975).

3. V. Solomonov, V. Osipov, A. Spirina, J. Lumin. **169**, 151 (2016).

4. В.И. Соломонов *и др.*, Опт. и спектр. **128**, 5 (2020).

Теория конденсированного состояния

Потенциал глубокого обучения для SiO_2: разработка, переносимость, предсказательная способность

И.А. Балякин[1,2]*, Р.Е. Рыльцев[1]

[1]Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: i.a.balyakin@gmail.com

Потенциалы глубокого обучения, основанные на искусственных нейронных сетях, являются одним из современных способов описания поверхности потенциальной энергии реальных материалов. Основная идея данного подхода лежит в том, чтобы на относительно малом наборе данных, полученных *ab initio* методом, создать модель поверхности потенциальной энергии, которую можно использовать в классических расчетах. Таким образом, потенциалы глубокого обучения позволяют решить проблему соотношения «производительность — точность», поскольку практически сохраняют *ab initio* точность, но при этом обладают на порядки большей вычислительной эффективностью, чем *ab initio* расчеты. В данной работе, при помощи программного пакета `DeePMD` [1], на основании набора данных, полученного в программном пакете `VASP` [2], методом активного обучения был создан потенциал глубокого обучения для диоксида кремния. При этом, следует отметить, что в тренировочный набор были включены только конфигурации, соответствующие расплаву. Однако, несмотря на это, данным потенциалом удалось описать зависимость энергии от объёма и для всех тетраэдрических кристаллических фаз – рис. 1. Подобная переносимость «жидкое – твердое», может быть перспективна для поиска новых кристаллических фаз в системах, в которых ближний порядок в жидкости может быть схожим с таковым в кристаллах. Так, например, похожий эффект был обнаружен в работе [3], где на основе информации только о жидкой воде, удалось описать фононные спектры нескольких модификаций льда с *ab initio* точностью.

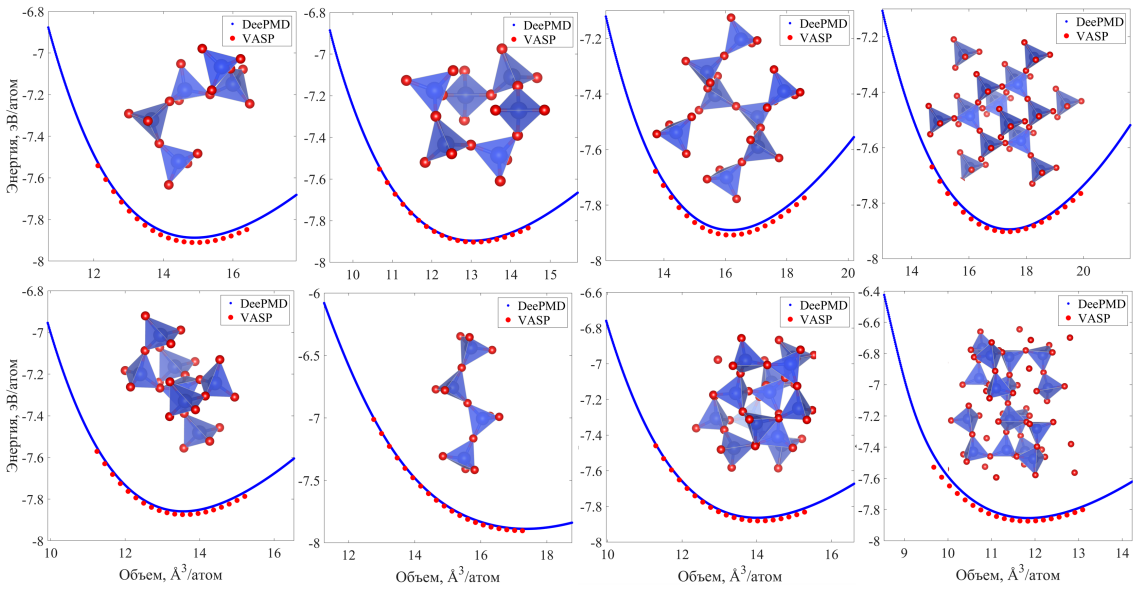


Рис. 1. Зависимости энергии от объема для тетраэдрических кристаллических фаз SiO_2.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-22-00506.

1. H. Wang *et al.*, Comput. Phys. Commun. **228**, 178 (2018).
2. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
3. B. Monserrat *et al.*, Nat. Commun. **11**, 5757 (2020).

Описание квазилокальных колебаний в аморфных твердых телах с помощью случайных коррелированных матриц

Д.А. Конюх, Я.М. Бельтюков*
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
*e–mail: ybeltukov@gmail.com

Изучение колебательных возбуждений аморфных диэлектриков (стекол) является важной задачей физики конденсированных сред. Большинство стекол демонстрируют универсальные колебательные свойства, которые существенно отличаются от свойств их кристаллических аналогов и проявляются во многих практических приложениях, связанных с транспортом фононов [1]. При частотах около 1 ТГц за универсальные свойства стекол ответственны так называемые квазилокальные колебания, которые определяют основной вклад в рассеяние акустических фононов [1]. Квазилокальные колебания являются долгоживущими колебаниями небольших групп атомов, слабо связанных со своим окружением. Исследование природы квазилокальных колебаний является важной и трудной задачей, осложненной рядом фактором, в первую очередь, их специфической статистикой. Как правило, количество квазилокальных колебаний в стеклах зависит от процессов охлаждения, влияющих на образование в структуре стекол аномально мягких участков [2]. Каждый мягкий участок имеет свою характерную частоту, что ведет к некоторому распределению частот квазилокальных колебаний. При этом охлажденная система приходит к метастабильному положению равновесия, которое обладает существенной корреляцией упругих констант связей. В связи с этим, изучение влияния структурного коррелированного беспорядка на квазилокальные колебания позволит расширить представление о микроскопических низкочастотных процессах колебаний в аморфных материалах.

Для изучения поставленного вопроса была применена теория коррелированных случайных матриц, показавшая свою эффективность для описания критерия Иоффе-Регеля и других наиболее общих колебательных свойств аморфных твердых тел [3, 4]. Колебания вблизи устойчивого положения неупорядоченной системы описываются случайной динамической матрицей M, и в случае сильного беспорядка, присущего аморфным телам, статистические свойства динамической матрицы наилучшим образом описываются ансамблем Вишарта $M = AA^T$. При этом статистика мягких участков связана со статистикой элементов матрицы A. В настоящей работе мы показываем, что количество и свойства квазилокальных колебаний существенно зависят от того, насколько эта статистика отличается от гауссовой. По мере увеличения степени негауссовости элементов матрицы A увеличивается количество квазилокальных колебаний, что проявляется в их плотности колебательных состояний $g_{\mathrm{qlv}} \sim \omega^s$, где степень s зависит от параметров негауссового распределения. Это приводит к дополнительному вкладу в бозонный пик и расширению диапазона частот кроссовера Иоффе-Регеля.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации, проект МК-1893.2022.1.2.

1. Д. А. Паршин, ФТТ **36**, 1809 (1994).
2. C. Rainone, E. Bouchbinder, E. Lerner, PNAS **117**, 5228 (2020).
3. Y. M. Beltukov, V. I. Kozub, D. A. Parshin, Phys. Rev. B **87**, 134203 (2013).
4. D. A. Conyuh, Y. M. Beltukov. Phys. Rev. B **103**, 104204 (2021).

Первопринципные исследования мартенситной фазы нанодвойниковых структур сплавов Гейслера на основе Ni — Mn — In с избытком Mn

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

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*e–mail: eragerk@rambler.ru

Двойниковые образования представляют собой «зеркальное» отражение атомной структуры (матрицы) в определенной плоскости, либо образуются поворотом структуры (матрицы) вокруг кристаллографической оси на некоторый угол, постоянный для данного вещества. Двойникование значительно влияет на механические свойства конечных сплавов: прочность, пластичность, хрупкость, а также на электрические, магнитные и оптические свойства. Несмотря на то, что многие стехиометрические сплавы Гейслера Ni_2MnZ, обладающие модулированной мартенситной структурой, имеют серьезные ограничения в их полноценном применении, связанные с рабочим температурным интервалом, поскольку температура Кюри достаточно велика, то управление температурами мартенситного и магнитного перехода можно реализовать посредством введения нестехиометрии.

В данной работе первопринципные вычисления двойниковых структур с периодом 1-1, 2-1, 2-2, 2-3, 2-4, 2-5, 2-6, 2-7, 3-3, 4-4, 5-5, 6-6, 7-7, 8-8 сплава $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$ были выполнены с помощью теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [1], в приближении GGA-PBE (рис. 1). Расположение избыточных атомов Mn рассчитывалось в программном пакете ATAT. Плотность **k** сетки составляла 15000 точек на узел обратной решетки. Энергия обрезки плоских волн составляла 460 эВ, а параметр сходимости по энергии равнялся 10^{-8} эВ/атом.

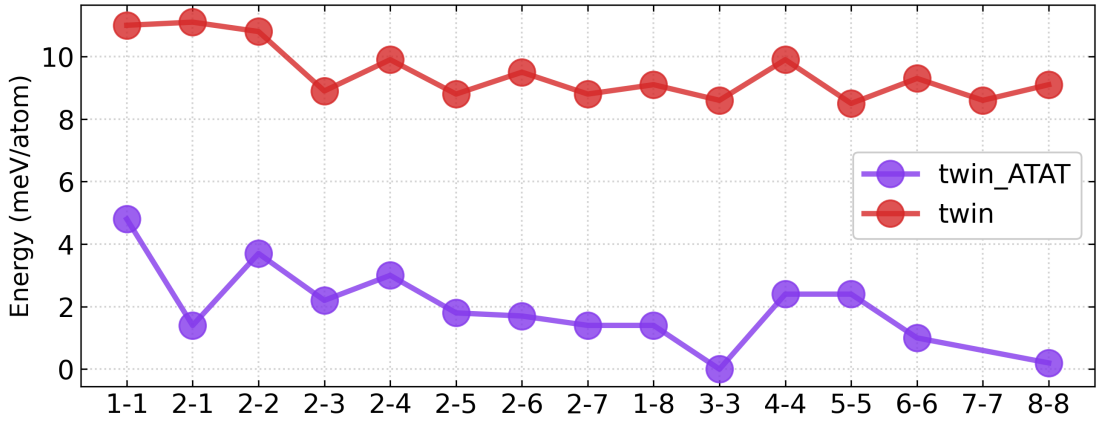


Рис. 1. Энергии основного состояния двойниковых структур с последовательным расположением атомов Mn и сгенерированных в программном пакете ATAT.

По данным проведенных исследований структуры, сгенерированные с помощью программного пакета ATAT, обладают большей по модулю энергией основного состояния, чем структуры с последовательным вдоль решетки расположением избыточного Mn, что указывает на фазовую стабильность композиций и их устойчивость к сегрегации. Распределение избыточных атомов Mn в подрешетке In не влияет на структурные характеристики сплавов во время геометрической оптимизации.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания № 075-01391-22-00.

1. G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B. **54**, 11169 (1996).

Генерирование эффективного многоспинового обменного взаимодействия тепловыми флуктуациями в $J_1 - J_2$ модели Гейзенберга на квадратной решетке

А.Н. Игнатенко*, В.Ю. Ирхин
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: ignatenko@imp.uran.ru

Биквадратичный обмен может приводить к усложнению фазовых диаграмм гейзенберговских магнетиков за счет возникновения дополнительных фаз и переходов первого рода [1]. Интересна возможность генерирования эффективного биквадратичного (и, более обще, многоспинового обмена) в спиновых моделях, содержащих только квадратичные по спину члены [2]. Архетипическим примером является модель Гейзенберга с обменом между первыми (J_1) и вторыми (J_2) соседями при $\eta = J_1/(2J_2) < 1$ [3]. Однако в подходе, предложенном в работах [2-3], эффективный мультиспиновый обмен (ЭМО) вычисляется в рамках спин-волнового приближения, предполагающего наличие дальнего магнитного порядка (ДМП), который отсутствует в этой модели при любых температурах $t > 0$ благодаря теореме Мермина-Вагнера. В приближениях, которые не предполагают наличие ДМП, эффективный биквадратичный обмен (вместе с ассоциированными с ним «флуктуационными щелями» в спектре спиновых волн) вообще может исчезнуть при переходе в парамагнитную область [4].

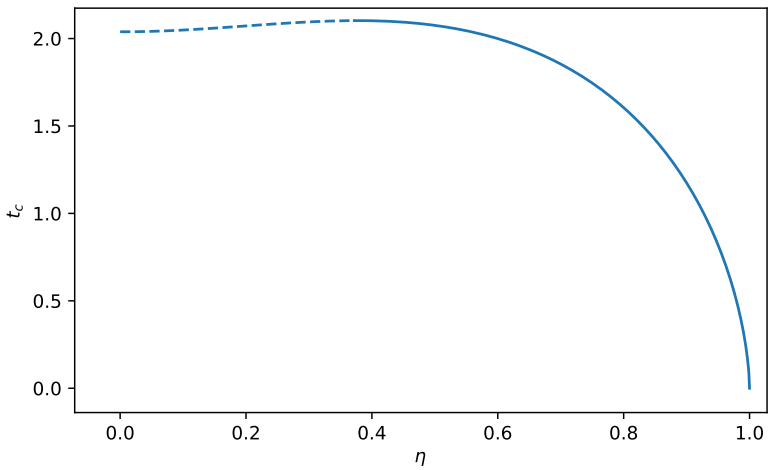


Рис. 1. Фазовая диаграмма. Пунктир (сплошная) — переход 1-го (2-го) рода.

В настоящей работе был вычислен ЭМО исходя из понятия эффективной свободной энергии («действия»), получаемой преобразованием Лежандра обычной свободной энергии по источникам. Вычисления были проведены полуаналитически в рамках метода $1/N$-разложения, который не предполагает ДМП. Была вычислена фазовая диаграмма, представленная на рис. 1. В данной конкретной модели мультиспиновый обмен приводит при низких температурах к состоянию изинговского нематика и соответствующему фазовому переходу в истинно парамагнитное состояние при росте температуры [3].

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Квант» Г.р. № 122021000038-7).

1. Э.Л. Нагаев, Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. — М.: Наука (1988).
2. C.L. Henley, J. Appl. Phys. **61**, 3962 (1987).
3. P. Chandra, P. Coleman, A.I. Larkin, Phys. Rev. Lett. **64**, 88 (1990).
4. A.N. Ignatenko, V.Yu. Irkhin, Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics, **9**(4), 454-458 (2016)

Условия формирования ферромагнетизма трехмерной электронной системы с гигантской сингулярностью ван Хова невырожденной зоны

П.А. Игошев[1]*, А.А. Катанин[2,1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Московский физико-технический институт, Москва, Россия
*e–mail: igoshev_pa@imp.uran.ru

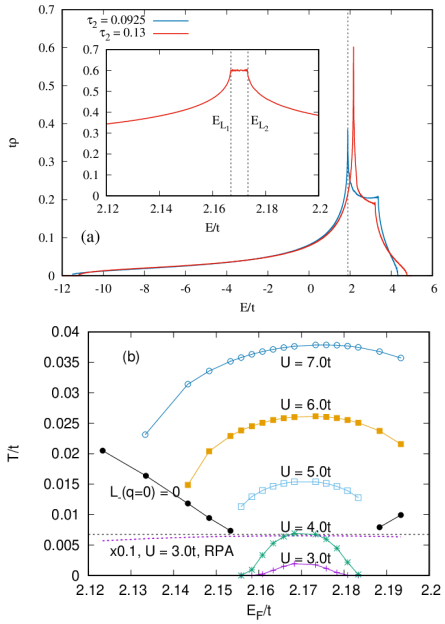


Рис. 1. (a) Плотность электронных состояний ГЦК решетки с $\tau = -0.13$, $\tau' = +0.13$ в окрестности структуры ван Хова. (b) Фазовая диаграмма невырожденной модели Хаббарда в переменных E_F–T_C.

Определение достаточных условий для формирования зонного ферромагнетизма (ФМ) представляет собой классическую и до сих пор нерешенную проблему. Считается, что классический критерий Стонера приводит к существенной (в несколько раз) переоценке температуры Кюри T_C и основан на соотношении между плотностью электронных состояний $\rho(E)$ на уровне Ферми E_F в парамагнитной фазе и параметра локального кулоновского взаимодействия U, что связано с пренебрежением влияния локальных и магнитных корреляций и конкуренцией различных каналов рассеяния электронов.

Мы рассмотрели формирование ФМ в невырожденной модели Хаббарда для гранецентрированной кубической решетки в приближении первых (интеграл перескока t), вторых (интеграл τt) и третьих (интеграл $\tau' t$) соседей, причем соотношение этих параметров подобрано так, чтобы эффективные массы в окрестности точки L зоны Бриллюэна были достаточно велики, что может создавать гигантскую сингулярность ван Хова $\rho(E)$. Было выбрано $\tau = -0.13$; при $\tau' = +0.0925$ точка ван Хова L обладает двумя бесконечными эффективными массами, при $\tau' > +0.0925$ от точки L отщепляются 2 точки ван Хова с очень близкими энергиями E_{L_1}, E_{L_2}, между которыми профиль $\rho(E)$ образует плато с бóльшим значением $\rho(E)$, чем в первом случае, см. рис. 1(a). В отличие от одиночного логарифмического пика ($\tau' = +0.0925$), эта особенность плотности состояний достаточно устойчива к изменению параметров спектра [1].

Была исследована температурная зависимость одночастично-неприводимых (1PI) 4-вершин электронного взаимодействия в рамках метода функциональной ренормгруппы в однопетлевом приближении [2], что позволяет прямо определить T_C, для которой 4-вершина в магнитном канале расходится на нулевом волновом векторе. Была построена фазовая диаграмма для параметров, соответствующих формированию логарифмической сингулярности плотности состояний ($\tau' = +0.0925$ точка ван Хова L обладает двумя бесконечными эффективными массами, при $\tau' > +0.0925$), и в случае $\tau' = 0.13 > 0.0925$, и положения уровня Ферми, находящимся на уровне плато и чуть левее или правее от него, см. рис. 1(b).

Таким образом, для формирования ФМ в невырожденной модели Хаббарда необходимо наличие достаточно широкого плато $\rho(E)$ (альтернативой может служить гигантская сингулярность ван Хова [1]), что существенно отличает ситуацию от двумерного случая, см. [3].

Работа выполнена в рамках госзадания «Квант» АААА-А18-118020190095-4 при частичной поддержке проекта РФФИ №20-02-00252а.

1. P. A. Igoshev and V. Yu. Irkhin, Physics of Metals and Metallography **120**, 1282 (2019).
2. C. Husemann and M. Salmhofer, Phys. Rev. B **79**, 195125 (2009).
3. A. A. Katanin and A. P. Kampf, Phys. Rev. B **68**, 195101 (2003).

Влияние поправок Бойса-Бернарди к ошибке суперпозиции базисного набора на геометрию двухслойного графена

М.В. Каплун, Е.В. Аникина

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия
*e–mail: kaplunmv@susu.ru

Мы исследовали двухслойный графен разной геометрической конфигурации: AA, AB и промежуточную между AA и AB – A(B). Исследование проводилось в программном пакете SIESTA [1], в расчетах использовались приближения локальной электронной плотности (LDA) и обобщенных градиентов (GGA) для обменно-корреляционного функционала. При вычислении энергии связи двухслойного графена учитывалась поправка Бойса-Бернарди к ошибке суперпозиции базисного набора и определялось межслойное расстояние [2].

После оптимизации структуры между LDA и GGA сравнивались энергия связи и межслойное расстояние для всех конфигураций двухслойного графена. Было показано, что приближение LDA лучше описывает исследуемые структуры, чем GGA. Полученные значения межслойного расстояния для AA и AB конфигураций были близки к экспериментальным значениям [3].

Следующим этапом мы вычислили энергию связи при разном значении межслойного расстояния для каждого из приближений обменно-корреляционного функционала в SIESTA.

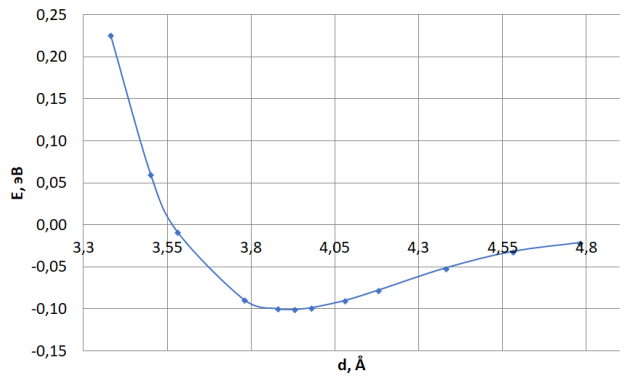


Рис. 1. Изменение энергии связи AB двухслойного графена в зависимости от межслойного расстояния d для приближения GGA. $d = 3.5$ Å — значение после оптимизации системы в SIESTA. Минимум энергии связи приходится на $d = 3.93$ Å.

Вычисления проводились при фиксации слоев графена по оси, перпендикулярной плоскости слоев. Межслойное расстояние изменялось с шагом равным ± 0.2 Å (GGA) и ± 0.05 Å (LDA) от значения, полученного после оптимизации структуры. На рис. 1 приведен пример исследования зависимости энергии связи с поправкой Бойся-Бернарди от межслойного расстояния для AB конфигурации.

В результате расчетов было показано, что минимум энергии связи двухслойного графена приходится на d, отличное от изначально оптимизированного значения. Такое отличие присутствует как в GGA, так и в LDA для всех исследуемых систем. Вероятно, такое поведение системы создается при использовании поправки Бойса-Бернарди к ошибке суперпозиции базисного набора, при котором создается искусственное «слипание» слоев, что влияет на итоговую геометрию структуры. Максимальное влияние поправок оказывается при использовании приближения GGA.

Исследование поддержано грантом «Поддержка молодой науки — 2021» и с использованием вычислительных ресурсов Южно-Уральского государственного университета.

1. J.M. Soler *et al.*, J. of Phys.: Cond. Mat. **14**, 2745 (2002).

2. S.F. Boys, F. Bernardi, Mol. Phys. **19**, 553 (1970).

3. M.V. Kaplun, E.K. Anikina, V.P. Beskachko, Bul. Of The SUSU. Series: Math. Mech. Phys. **14**, 61 (2022).

Исследование электронной структуры в ряде Co содержащих изоструктурных аналогов железных сверхпроводников

Н.С. Павлов[1,2*], И.Р. Шеин[3], К.С. Перваков[2], И.А. Некрасов[1,2]

[1]Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
[3]Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: pavlovns@gmail.com

Открытие высокотемпературных сверхпроводников на основе пниктидов и халькогенидов железа [1,2,3] породило поиск новых химических или структурных аналогов и совершенно новых соединений данного класса, например [4,5]. Среди аналогов железных сверхпроводников есть сверхпроводящие системы, но с малой критической температурой сверхпроводящего перехода T_C. Однако многие из вновь полученных систем не являются сверхпроводниками. Актуальным является теоретическое изучение таких систем (известных и потенциально возможных), в которых может реализоваться сверхпроводимость. Для теоретического изучения сверхпроводящего состояния необходимо знать электронную структуру нормальной фазы. Электронную структуру можно рассчитать, используя первопринципные зонные расчёты, которые основаны на теории функционала электронной плотности (DFT). Для изучения реальных соединений с электрон-электронными корреляциями используют расчётные схемы, объединяющие в себе первопринципные методы (DFT) и такие подходы, как теория динамического среднего поля (DMFT) – DFT+DMFT [6].

В данной работе исследована электронная структура ряда изоструктурных аналогов железных сверхпроводников $BaCo_2As_2$, $InCo_2As_2$, $InKCo_4As_4$ в рамках DFT+DMFT подхода и сопоставлена с $BaFe_2As_2$. Установлено, несмотря на достаточно большую величину электрон-электронных корреляций (локальное кулоновское взаимодействие на Co-3d оболочке U=4.0 эВ, хундовское обменное взаимодействие J=0.85 эВ), в рассмотренных системах наблюдается относительно небольшая величина перенормировки массы $1.2 - 1.35$ на уровне Ферми. При этом корреляционные эффекты приводят к заметному смещению и сжатию спектра вдалеке от уровня Ферми и небольшому — вблизи.

Соединения $InCo_2As_2$ и $InKCo_4As_4$ [7] экспериментально не синтезированы. Зонная структура $BaCo_2As_2$ и $InCo_2As_2$ вблизи уровня Ферми качественно схожа, и существенно отличается от зонной структуры $BaFe_2As_2$. Экспериментально $BaCo_2As_2$ не является сверхпроводником. А вот в системе $InKCo_4As_4$ зоны вблизи уровня Ферми напоминают зонную структуру $BaFe_2As_2$ и поверхности Ферми имеет схожую топологию. Это косвенно указывает на возможность реализации сверхпроводимости в $InKCo_4As_4$. На основе DFT+DMFT расчётов $InKCo_4As_4$ видно, что при небольшой величине электронного или дырочного допирования будут происходить переходы Лифшица.

Работа выполнена при частичной поддержке РНФ (грант №21-12-00394).

1. М.В. Садовский, УФН **178**, 1243 (2008).
2. G.R. Stewart, Rev. Mod. Phys. **83**, 1589 (2011).
3. М.В. Садовский, УФН **186**, 1035 (2016).
4. M. Neupane, C. Liu, S.-Y. Xu, Y.-J. Wang, N. Ni *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 094510 (2012).
5. I.A. Nekrasov and M.V. Sadovskii, JETP Lett. **99**, 598 (2014).
6. G. Kotliar, S.Y. Savrasov, K. Haule *et al.*, Rev. Mod. Phys. **78**, 865 (2006).
7. B.Q. Song, M.C. Nguyen, C.Z. Wang, P.C. Canfield, K.M. Ho, Phys. Rev. Mater. **2**, 104802 (2018).

Изучение одноионной магнитной анизотропии в моноионном магнетике $(PPh_4)_2[ReF_6]\cdot 2H_2O$

Л.С. Таран[1]*, В.Ю. Елфимова[2], С.В. Стрельцов[1]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e–mail: taran@imp.uran.ru

Мономолекулярные магнетики представляют собой перспективную группу соединений, потенциальным применением которых является создание спиновой электроники и устройств хранения информации высокой плотности. В последние 10 лет идёт активное изучение так называемых моноионных магнетиков — подгруппы мономолекулярных магнетиков, на основе которых создаются магнитные материалы [1]. Одним из таких представителей является $(PPh_4)_2[ReF_6]\cdot 2H_2O$. В статье, посвящённой спектрометрическому исследованию данной структуры, оценка параметра аксиального расщепления в нулевом поле D была приблизительной и составляла 34 К. Поэтому целью данной работы является теоретическая проверка и уточнение экспериментальных результатов.

Исследование моноионного магнетика $(PPh_4)_2[ReF_6]\cdot 2H_2O$ происходило с помощью первопринципных расчётов в рамках теории функционала плотности с учётом спин-орбитального и кулоновского взаимодействий. В ходе работы была определена магнитокристаллическая анизотропия типа лёгкая плоскость и получено значение параметра $D = 9.9$ K, который оказался меньше экспериментального результата. Полученное D для $(PPh_4)_2[ReF_6]\cdot 2H_2O$ по величине превосходит большинство известных $3d$ мономолекулярных магнетиков [2], Также было установлено, что расщепление t_{2g} и e_g уровней составляет 285 мэВ, что существенно меньше типичного расщепления в $3-4$ эВ в других $5d$ системах [3]. Небольшая величина расщепления кристаллического поля, вероятно, является причиной сильной одноионной магнитной анизотропии, способствуя примешиванию e_g к t_{2g} за счёт спин-орбитального взаимодействия и приводя к размораживанию орбитального момента.

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

1. K.S. Pedersen, M. Sigrist, M.A. Sorensen, A.-L. Barra, T. Weyhermüller, S. Piligkos, C.A. Thuesen, M.G. Vinum, H. Mutka, H. Weihe, R. Clerac, J. Bendix, Angew. Chem., Int. Ed. **53** (2014).
2. J. Krzystek, A. Ozarowski, J. Telser, Coordination Chemistry Reviews **250**, 17 (2006).
3. D.I.Khomskii, S.V.Streltsov, Chem. Rev. **121**, 5 (2021).

Взаимосвязь эффекта Яна-Теллера и спин-орбитального взаимодействия для t_{2g} орбиталей и тригональных колебаний

Ф.В. Темников*, С.В. Стрельцов, К.И. Кугель, Д.И. Хомский

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

*e–mail: temnikov.fedor.v@gmail.com

Эффект Яна-Теллера и спин-орбитальное взаимодействие являются важными явлениями физики конденсированного состояния, поскольку они определяют ряд необычных свойств переходных металлов. С помощью ян-теллеровских деформаций описывается высокотемпературная сверхпроводимость купратов [1], когда как сильное спин-орбитальное взаимодействие может приводить к экзотическим фазам вещества, включающим, например, октупольные упорядочения в d-соединениях [2].

Однако на текущий момент взаимосвязь спин-орбитального взаимодействия и эффекта Яна-Теллера не была исследована в общем случае, без использования теории возмущения, в которой одно из рассматриваемых явлений считается гораздо слабее другого. В данной работе анализируется модель, в которой отсутствует необходимость в подобном приближении. Рассматриваемая система представляет собой ион переходного металла в центре октаэдрического окружения лигандов. Электроны на t_{2g} уровне иона взаимодействуют с тригональными колебаниями окружающих лигандов – это так называемая $t \otimes T$ задача Яна-Теллера. Решение этой задачи проводилось путём точной диагонализации гамильтониана, что позволило выполнить расчёты для произвольных значений коэффициента Яна-Теллера и константы спин-орбитального взаимодействия.

Было установлено, что для случая одного электрона на t_{2g} орбитали эффект Яна-Теллера частично подавляется спин-орбитальным взаимодействием. Для систем с двумя, четырьмя и пятью электронами ян-теллеровские деформации могут быть подавлены полностью. Наконец, при наполовину запоненной оболочке (три электрона на t_{2g} уровне) спин-орбитальное взаимодействие усиливает эффект Яна-Теллера. [3]

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

1. M. Imada *et al.*, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).

2. T. Takayama *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **90**, 062001 (2021).

3. S.V. Streltsov *et al.*, Phys. Rev. B. **105**, 205142 (2022).

Атомистическое моделирование сплавов Al — Cu с помощью потенциалов глубокого машинного обучения

Е.О. Хазиева[1]*, А.О. Типеев[1], Н.М. Щелкачев[2], Р.Е. Рыльцев[1]

[1]Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина, Москва, Россия
*e–mail: cat.hazieva@yandex.ru

В последние несколько лет достигнут революционный прогресс в построении классических межатомных потенциалов взаимодействия методами машинного обучения [1-6]. Основная идея такого подхода — аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью некоторой многочастичной функции общего вида (например, многослойной нейронной сети) используя эталонные значения, полученные с помощью *ab initio* расчетов. Классическая молекулярная динамика с такими потенциалами позволяет получить результаты, сравнимые по точности с *ab initio* методами при на 3-4 порядка меньших вычислительных затратах. Тем не менее, многие важные вопросы, связанные с методами обучения и использования таких потенциалов до сих пор не решены.

Мы рассматриваем бинарные сплавы Al-Cu, которые являются интересными модельными системами для изучения возможностей потенциалов машинного обучения. Во-первых, они представляют собой смеси металлов с различными электронными конфигурациями: *p*-металл (Al) и благородный *s*-металл (Cu), и потому демонстрируют сложное химическое взаимодействие между компонентами, которое вызывает нетривиальное поведение. Например, в данной системе образуется ряд сложных интерметаллических фаз и наблюдается немонотонное поведение физико-химических свойств расплавов при изменении состава. Во-вторых, как сами бинарные сплавы Al–Cu, так и соответствующие чистые компоненты Al, Cu, представляют самостоятельный фундаментальный интерес (как модельные системы) и большое практическое значение.

Для разработки потенциалов глубокого обучения (DP — Deep Potentials) для расплавов Al–Cu мы используем пакет `DeePMD-kit` [7], в котором в качестве регрессионной модели используется многослойные нейронные сети прямого распространения. С помощью потенциала, натренированного на разных конфигурациях, были проверены ряд свойств расплавов Al–Cu. Мы показываем, что DP очень хорошо воспроизводит *ab initio* данные для энергий, сил и вириалов, а также функции радиального распределения и функции автокорреляции скорости, извлеченные из AIMD. Экспериментальные данные для плотности и структурных характеристик расплавов также воспроизводятся с хорошей точностью. Так же были смоделированы фазовые превращения, как чистого компонента Al, так и одного из интерметалидов, результаты которых находятся в хорошем согласии с экспериментом. Проведены предварительные тесты для оценки возможности моделирования нуклеации в переохлажденных жидкостях, количественного расчета транспортных свойств и описания пластических деформаций.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 22-22-00506).

1. A. Singraber *et al.*, Theory Comput. **15**, 1827 (2019).
2. L. Zhang, J. Han, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Lett. **120**, 143001 (2018).
3. L. Zhang, D.-Y. Lin, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Materials **3**, 023804 (2019).
4. F. Karsai, G. Kresse, M. Bokdam, Phys. Rev. Lett. **122**, 225701 (2019).
5. T. Mueller, A. Hernandez, and C. Wang, J. Chem. Phys. **152**, 050902 (2020).
6. Y. Zhang *et al.*, Phys. Commun., 107206 (2020)
7. T. Wen *et al.*, Materials Futures **1**, 022601 (2022).

Структурные особенности жидкого висмута: DFT анализ

А.А. Цыганков, Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
*e–mail: tsigankov.artiom@yandex.ru

Большинство жидкостей с точки зрения теории можно характеризовать наличием ближнего порядка в структуре, причем на больших расстояниях порядок отсутствует. Но случай жидкого висмута занимает особое место, поскольку в нем имеются аномалии, не описывающиеся современными моделями. Одно из них — это наличие плеча в радиальной функции распределения и статическом структурном факторе [1, 2], являющееся нетипичным для жидкостей. Радиальная функция распределения является вероятностной характеристикой найти частицу на определенном расстоянии от другой частицы, то можно сделать вывод, что данная особенность может возникнуть только в том случае, если частицы притягиваются друг к другу на относительно малое расстояние размерами порядка от 3.2 до 4.6 Å, приводящее к образованию димеров, кластеров [3] или цепочек. Для проверки воспроизводимости структурных особенностей жидкого висмута современными вычислительными методами было проведено *ab-initio* моделирование молекулярной динамики в пакете VASP [4-7], использующем методы теории функционала плотности (DFT). Для определения возможности существования стабильных структур в жидком висмуте было рассчитано распределение частиц по временам соседства из полученных результатов моделирования *ab-initio* молекулярной динамики. Результаты показали, что в областях, ограниченных сферой радиуса 5 Å, имеются устойчивые образования со временем жизни более, чем 200 фс.

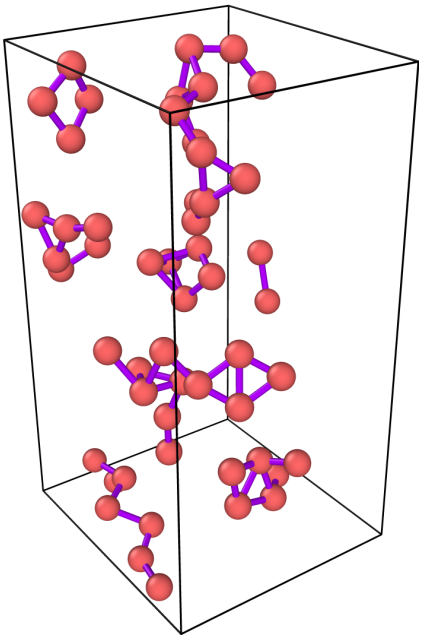


Рис. 1. Структуры в висмуте.

Для идентификации таких структур были оценены параметры порядка q_4 и q_6 [8]. Результаты показали, что в жидком висмуте образуются структуры, не идентифицируемые однозначным образом.

При анализе полученных данных моделирования было установлено методами кластерного анализа, что в висмуте реализуются устойчивые структуры по типу цепочек и димеров, показанные на рис. 1.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030». АВМ признателен фонду развития теоретической физики и математики «Базис».

1. Y. Waseda, K. Suzuki, Phys. Stat. Sol. (b) **49**, 339, (1972).
2. Y. Greenberg *et al.*, Europhysics Letters **86**, 36004 (2009).
3. J. Akola et al., J. Chem. Phys. **141**, 194503 (2014).
4. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
5. G. Kresse, J. Furthmuller, Comput. Mat. Sci. **6**, 15 (1996).
6. G. Kresse, J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
7. G. Kresse, J. Hafner, J. Phys.: Condens. Matt. **6**, 8245 (1994).
8. P. Steinhardt *et al.*, Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).

Биофизика

Исследование структуры фосфатидилхолиновых мембран с магнитными наночастицами $CoFe_2O_4$

П.Н. Астанина[1,2*], О.В. Коплак[2]

[1]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
[2]Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия
*e–mail: p_astanina@mail.ru

Магнитные наночастицы (МНЧ) используются в фармацевтической, медицинскойромышленности, сфере доставки лекарств и здравоохранения [1-4]. Чтобы попасть в клетку, МНЧ перемещаются через клеточную мембрану, которая является фундаментальным биологическим барьером. Понимание молекулярного механизма, лежащего в основе прямого проникновения магнитных наночастиц, может в значительной степени способствовать реализации оптимального метода доставки МНЧ и лекарственных веществ. Однако молекулярный механизм таких явлений плохо изучен.

Целью работы является анализ изменения структуры фосфатидилхолиновой липидной мембраны под воздействием магнитных наночастиц $CoFe_2O_4$ с диагональю 14 нм, которые обладают хорошей биосовместимостью и считаются перспективными для противораковых и других медицинских применений [5]. При добавлении МНЧ наблюдаются изменения в спектре ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и инфракрасном спектре (ИК). Присутствие наночастиц в мембранах доказано методами атомно-силовой и магнитно-силовой микроскопии (АСМ и МСМ, соответственно). Структурные изменения в мембранах вблизи липидных CO-связей, вызванные магнитными наночастицами, наблюдаются с помощью сканирующей оптической микроскопии ближнего поля (s-SNOM). Анализ спектров ядерного магнитного резонанса (ЯМР) позволил нам идентифицировать атомные группы в поверхностных слоях мембраны, которые изменились под действием МНЧ.

Магнитные наночастицы $CoFe_2O_4$ вызывают в липидной мембране структурную реорганизацию и создание пор. Липидные слои, где расположены хвосты липидных молекул, демонстрируют изменения в ИК спектрах при волновых числах 980 $см^{-1}$ и 1020 $см^{-1}$, соответствующих образованию связей Fe—OH и Fe—C—H. Визуализация участков мембраны при этих волновых числах с помощью микроскопии s-SNOM выявляет искаженную структуру мембраны вокруг отдельных наночастиц. Перераспределение интегральных интенсивностей линий в спектрах ЯМР указывает на структурные изменения области мембраны, где расположены липидные хвосты.

1. W. H. De Jong, P. J.A. Borm, Int. J. Nanomedicine. **3**, 2, 133 (2008).
2. T.J. Ashaolu, Environ. Chem. Lett. **19**, 3381 (2021).
3. P. Shine, C. Malik, J. of Drug Delivery Science and Technology. **58**, 101838 (2020).
4. R. Foulkes, E. Man, J. Then, S. Young, A. Joy, C. Hopkins, Biomater. Sci., **8**, 4653 (2020).
5. B.J. Park, K.H. Choi, N.K. Chang, M. Jeeeun, L. Kyu-Dong, U. H. Sup, J. Nanosc. And Nanotechnol, **15**, 10, 7900 (2015).

Использование гидростатического давления и одноосного сжатия для преодоления твердосемянности у солодки

А.Ю. Беляев*, Н.А. Кругликов[2]
[1]Институт экологии растений и животных УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: belyaev@ipae.uran.ru

Солодка (*Glycyrrhiza uralensis*) — источник особо ценного лекарственно-технического сырья (корней и корневищ), широко используемого во всем мире. Разрабатываются технологии семенного размножения этого растения в промышленных масштабах. При этом серьезной проблемой является твердосемянность: в связи с особым строением очень прочной семенной кожуры до 90% семян солодки не набухает и не прорастает даже при самых благоприятных условиях. Это так называемые твердые семена, для прорастания им требуется скарификация (повреждение семенной кожуры при сохранении целостности зародыша, находящегося в анабиозе). В наших предыдущих работах показана перспективность использования гидростатического давления для предпосевной обработки твердых семян солодки [1,2]. Цель данного исследования — определение оптимальных режимов воздействия гидростатическим давлением на семена солодки для преодоления твердосемянности.

По ранее апробированной методике [2] проведены лабораторные эксперименты с семенами солодки, собранными в 2012 году в Республике Казахстан в одной популяции. На этот раз уровень давления был увеличен. Проращивание контрольной группы показало, что доля твердых семян составляет 86%. Барообработку семян проводили в лабораторном гидростате давлением от 100 МПа до 250 МПа в различных режимах. Каждый из четырех вариантов опыта включал три повторности по 50 семян, которые проращивались в чашках Петри на влажной фильтровальной бумаге под люминесцентными лампами (12 ч освещение, 12 ч темнота) при 23°С в течение 17 дней. Изучение индивидуальной и групповой механической прочности твердых семян солодки при одноосном сжатии проводили на машине для механических испытаний Shimadzu AGS-X. После сжатия семена проращивали.

Установлено, что однократное воздействие на твердые семена гидростатическим давлением 100 МПа обеспечивает прорастание в среднем 42% таких семян, а после трехкратного воздействия таким уровнем давления 57% твердых семян приобретают способность к прорастанию. Двукратная обработка давлением 250 МПа с добавочным воздействием 200 МПа оказалась избыточной: более 90% семян погибло, немногочисленные проростки имели поврежденный корешок. При одноосном сжатии семян группами по 5 и 10 шт. возникали значительные повреждения зародышей. При индивидуальном одноосном сжатии семян нарушение целостности семенной кожуры происходило при нагрузке около 100 Н, отмечен слабый разброс значений нагрузки разрушения, что указывает на однородность исследуемой выборки семян. Индивидуальное сжатие обеспечило хорошую сохранность зародышей и нормальное развитие проростков 80% обработанных семян. Такая методика применима для преодоления твердосемянности у солодки при селекционных исследованиях. Проращивание семян позволило установить, что в вариантах с нагрузками 100 МПа и трижды по 100 МПа не произошло повреждения тканей зародыша. Это указывает на допустимость таких уровней и режима использования гидростатического давления для предпосевной обработки семян солодки, но оптимум давления может быть уточнен.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-26-00346, https://rscf.ru/project/22-26-00346/.

1. N.A.Kruglikov et al., E3S Web of Conf. **222**, 03025 (2020).
2. N.A.Kruglikov et al.,Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **86**, 2, 170 (2022).

Механические свойства и способность к насыщению водой семян лекарственных растений

Н.А. Кругликов[1*], А.Ю. Беляев[1,2], Е.А. Шарова[1,3]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт экологии растений и животных УрО РАН, Екатеринбург
[3]Ботанический сад УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: nick@imp.uran.ru

Исследование влияния предпосевной обработки семян хозяйственно-ценных бобовых растений высоким уровнем гидростатического давления оказалось перспективным в плане преодоления твердосемянности [1, 2]. Этим обусловлена необходимость решения смежных задач. В частности, для растений, у которых высока доля (80 – 90%) твердых семян, важны методики определения оптимальных, эффективных уровней гидростатического давления по механическим свойствам семян, новые методики механической скарификации, исключающие существенные повреждения зародышей семян. Для растений, семена которых способны к естественному набуханию при увлажнении, необходима разработка методик для оценивания скорости поглощения воды семенами под давлением в процессе барообработки.

Цель данного исследования — поиск новых методик оценки механических свойств семян и изучение поглощения воды семенами при воздействии гидростатическим давлением.

Для одноосного сжатия семян использовали испытательную машину Shimadzu AGS-X с максимальным усилием 20кН и записью деформационных кривых. Сжатие проводили до появления первой трещины. Эту же машину использовали совместно с гидроцилиндром для опытов по насыщению семян водой под давлением от 5 до 20 МПа для изучения последействия быстрого поглощения воды семенами во время обработки. Для определения твердости покровов семян по Виккерсу использовали микротвердомер того же производителя. Для солодки уральской было проведено оценивание групповой и индивидуальной прочности оболочки семян и ее твердости по Виккерсу. В случае расторопши изучали вопрос об ускоренном насыщении семян водой под давлением. После обработок семена проращивали. В экспериментах с семенами солодки установлено, что максимальная индивидуальная нагрузка на семена составляет 100Н. В случае испытаний на групповую прочность максимальное усилие определялось прочностью семян, участвующих в деформировании на начальном этапе. Поэтому такой метод менее информативен, но позволяет быстрее провести испытания или скарификацию для большей группы семян. После индивидуальных испытаний (со снятием нагрузки в момент появления трещины в семенной кожуре) семена прорастали более успешно. В то же время твердость наружных покровов семенной кожуры оказалась 85.6 HV при нагрузке 250 мН (в деформировании участвовала только семенная кожура). Для набухших семян солодки подходящий уровень нагрузки составил 100 – 500 мН. В случае увеличения нагрузки для таких семян возникало явное деформирование внутренних структур семени (наблюдалось смещение отпечатка). Эксперименты с семенами расторопши выявили активное поглощение воды с уменьшением суммарного объема семян и жидкости во время барообработки. Взвешивание семян показало увеличение массы семян после обработки (44.7% для 100 шт), и ее уменьшение на то же значение при дальнейшем хранении в течение суток без упаковки. На кривой нагружения во время фиксации усилия наблюдалось плато, соответствующее уменьшению объема.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-26-00346, https://rscf.ru/project/22-26-00346/

1. А.Е. Крисс, Жизненные процессы и гидростатическое давление. — М.: Наука. (1973).
2. N.A. Kruglikov *et al.*, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **86**, 2 (2022).

Моделирование кластеризации ионных каналов в липидных мембранах

И.А. Ларионов
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
e–mail: Larionov.MRSLab@mail.ru

В процессах передачи возбуждения от одной клетки к другой важная роль принадлежит так называемым лиганд-управляемым ионным каналам. Эти каналы в частности функционируют в области постсинаптической мембраны синапсов химического типа. В этих синапсах информация от клетки к клетке передается посредством нейромедиаторов – специальных веществ, освобождаемых пресинаптической клеткой в синаптическую щель в ответ на деполяризацию нервных окончаний потенциалом действия и взаимодействующих с лиганд-управляемыми ионными каналами постсинаптической мембраны. В результате связывания молекулы нейромедиатора с канальным белком лиганд-управляемые каналы открываются, и в области синаптического контакта возникают токи, изменяющие потенциал покоя постсинаптической клетки.

Методами математического моделирования проведена оценка возможности взаимных смещений активированных ионных каналов, свободно «плавающих» в липидной фазе хемовозбудимой клеточной мембраны, обусловленных амперовским взаимодействием протекающих через них токов [1]. Приведены в аналитической форме выражения для смещений двух параллельных проводников конечной длины, находящихся в вязкой среде, за счет амперовского притяжения. С учетом латеральной диффузии и амперовского взаимодействия ионных каналов в липидном матриксе постсинаптической мембраны последовательно рассмотрены динамика одиночных ионных каналов, расположенных в зоне действия кванта медиатора («пятна») и динамика кластеров ионных каналов “пятен” при ритмической активации постсинаптической мембраны несколькими синхронно освобожденным квантами медиатора. Выявлена тенденция к объединению каналов в единый большой кластер, которому предшествует промежуточная кластеризация с расположением ионных каналов и субкластеров из них в виде треугольной решетки. Показано, что ввиду слабости амперовского взаимодействия этот процесс происходит по физиологическим меркам чрезвычайно медленно и при коэффициенте латеральной диффузии, существенно меньшем оцененного экспериментально, что возможно для массивных кластеров из ионных каналов, предварительно образовавшихся за счет сил контактного белок-белкового взаимодействия.

Для объяснения быстрого образования и роста кластеров из ионных каналов в липидных мембранах предложена двумерная модель коагуляции [2], по аналогии с трёхмерной моделью, разработанной для объяснения явления коагуляции аэрозолей [3]. Предполагается, что при активации ионных каналов они приобретают способность слипаться при столкновении. Такое предположение означает, что, например, для лиганд-активируемых каналов нейромедиатор не только открывает их, но и, возможно, действует на них как поверхностно-активное вещество. Результаты расчетов показывают, что образование кластеров происходит за время порядка нескольких секунд или долей секунд в зависимости от значения коэффициента латеральной диффузии, и эффективный радиус кластера растет со временем как $r_C \sim t^{\alpha}$, где $0.3 \leqslant \alpha \leqslant 0.4$ с последующим замедлением и насыщением в качественном согласии с известными данными наблюдений [4].

1. И.А. Ларионов, А.Л. Ларионов, Е.Е. Никольский, Биол. мембраны **35**, 3 (2018).
2. I.A. Larionov, A.L. Larionov, E.E. Nikolsky, M.N. Shneider, arXiv:1806.08373 (2018).
3. В.Г. Левич, Физико-химическая гидродинамика. М.: ГИФМЛ (1959).
4. C.A. Stanich et al., Biophys. J. **105**, 444 (2013).

Оценка посевных качеств семян салата после барообработки

С.Д. Процив[1]*, Н.А. Кругликов[2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: stepan3785@mail.ru

Давление и температура являются важнейшими факторами окружающей среды, оказывающими прямое влияние на состояние живых организмов, в частности сельскохозяйственных культур [1]. Барообработка, т.е. воздействие на растения давлением, является относительно новым методом биофизических исследований.

Салат — распространенная зеленая культура, обладающая ценными лечебными и диетическими свойствами. В нем содержатся витамины и разнообразные микроэлементы. Удобными особенностями салата является его полная съедобность, большая скорость вегетации и неприхотливость, что позволяет получать максимальное количество этого пищевого продукта при минимальных затратах. Это делает салат культурой, востребованной в специфичных условиях, когда потребность человека в витаминах и полезных микроэлементах остается, а условия этому не способствуют. Например, при длительных путешествиях в ограниченном пространстве. Целью данной работы являлось исследование влияния барообработки на посевные качества семян салата.

Мы исследовали посевные качества семян салата сорта «Успех» прошедших предварительную барообработку. Было исследовано 5 групп (контрольная, 5 МПа, 10 МПа, 15 МПа, 20 МПа) по 100 семян. Барообработку проводили в дистиллированной воде в гидроцилиндре. Для создания механического усилия и записи данных о перемещении поршней использовали машину для механических испытаний Shimadzu AGS-X с максимальным усилием 2 кН. Скорость набора давления составляла 80 кПа/с. Время удержания давления после набора усилия составляло 5 мин. Сброс давления осуществляли в течение 1 секунды. После обработки семена высушивали и высаживали в герметичные контейнеры на смоченную дистиллированной водой фильтровальную бумагу. Проращивание проводили в темноте при температуре 20°C. Спустя 4 дня с момента посадки были проведены измерения длины ростков и корешков растений. Для измерения массы семян и проростков после высушивания использовали весы с ценой деления 0.01 г. По результатам исследования были сделаны следующие выводы: во всех группах, на которые было оказано давление, увеличилась общая длина проростка относительно контрольной группы (13,7 мм). В среднем проростки наибольшей длины (18,5 мм) получились из семян, обработанных давлением в 15 МПа, но при этом немного упали показатели всхожести (87 из 100) относительно контрольной группы (93 и 100). Общая длина проростков в этой группе равна 1612,5 мм. После обработки при 10 МПа показатели всхожести сильно просели (83 из 100) при увеличившейся средней длине проростка на 3,2 мм. При давлении в 5 МПа и 20 МПа результаты получились схожими. Следует выделить семена, обработанные давлением 20 МПа. Ростки этой группы лидируют по общей длине проростков 1628 мм и количеству всхожих семян (94 из 100).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-26-00346, https://rscf.ru/project/22-26-00346/.

1. Н.А. Кругликов, А.Г. Быструшкин, А.Ю. Беляев, Известия РАН. Серия физическая **86**, 219 (2022)

Всхожесть семян укропа после барообработки

С.Ю. Шаваров[1]*, Н.А. Кругликов[2]

[1]Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: stas.shavarov.81@mail.ru

Для развития растениеводства требуется изучение различных физических факторов, влияющих на прорастание семян. При достаточно глубоком изучении таких факторов можно моделировать и применять наиболее эффективные агротехники. Одним из малоизученных факторов является гидростатическое давление, его влияние на семенаЁ[1].

Укроп — широко распространенная культура во всех странах мира. Растение устойчиво к большинству заболеваний, его агротехника достаточно проста. Фитомасса укропа богата витаминами, минеральными солями, кислотами и эфирным маслом, придающим растению специфический аромат. Укроп используют в кулинарии и как лекарственное растение. Целью данной работы являлось исследование влияния обработки семян укропа гидростатическим давлением на их лабораторную всхожесть.

Перед посевом семена подвергали обработке давлением от 5 до 20 МПа (с шагом в 5 МПа) в гидроцилиндре, заполненном дистиллированной водой. Для создания механического усилия и записи данных использовали испытательную машину Shimadzu AGS-X с максимальной нагрузкой 20 кН. Давление набирали со скоростью 80 кПа/с, удерживали его в течение 5 минут и сбрасывали в течение 1 секунды. Семена после барообработки без подсушивания помещали в герметичные контейнеры на увлажненную фильтровальную бумагу. Проращивание проводили в темноте при температуре 20°C в соответствии с ГОСТ [2]. Контейнеры регулярно открывали для вентилирования и учета проросших семян.

Результаты учета проросших семян на седьмые сутки после посева представлены в табл. 1. По полученным данным можно сделать вывод, что барообработка в исследованном диапазоне давлений угнетает прорастание семян укропа. Влияние испытанных режимов барообработки семян укропа на дальнейшее развитие растений требует дополнительного изучения.

Таблица 1. Прорастание семян укропа сорта «Грибовский» на 7-е сутки после посева.

Количество семян, шт	Давление, МПа				
	0	5	10	15	20
Посажено	105	82	89	81	77
Взошло	29	7	14	9	6
Доля проросших семян, %	28	9	16	11	8

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-26-00346, https://rscf.ru/project/22-26-003466/.

1. Н.А. Кругликов, А.Г. Быструшкин, А.Ю. Беляев, Влияние экстремальных физических факторов на биологические свойства семян солодки уральской. — Известия РАН. Серия физическая **86**, 219 (2022).
2. ГОСТ 12038-84, Межгосударственный стандарт, Семена сельскохозяйственных культур, Методы определения всхожести, 21 (1986).

Влияние гидростатического давления на прорастание семян расторопши пятнистой в открытом грунте на Среднем Урале

Е.А. Шарова[1,2*], Н.А. Кругликов[2], А.Ю. Беляев[2,3]

[1]Ботанический сад УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Институт экологии растений и животных УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e–mail: kosheelena@yandex.ru

В последнее время влияние гидростатического давления на семена и последующее развитие из них растений изучается с целью увеличения продуктивности сельскохозяйственных культур, улучшения их биохимических характеристик, увеличения выхода лекарственного растительного сырья [1]. Объект нашего исследования – расторопша пятнистая (*Silybum marianum* L.), выращивается как лекарственное растение, у которого заготавливают плоды (семянки), содержащие уникальные биологически активные соединения — флаволигнаны. По многолетним исследованиям известно, что для расторопши характерна неравномерность появления полевых всходов. Актуален поиск способов предпосевной обработки ее семян для достижения их дружного и ускоренного прорастания в экстремальных погодных условиях Среднего Урала. Цель исследования: изучение влияния гидростатического давления на прорастание семян расторопши пятнистой в условиях открытого грунта.

Исследование проводили в Ботаническом саду УрО РАН. Использовались семена собственной репродукции урожая 2021 года, которые перед посевом подвергались воздействию гидростатического давления в водной среде в диапазоне от 5 до 20 МПа в течение 5 и 10 мин., семена при этом набухали. Наши предварительные исследования показали, что более высокие уровни давления неблагоприятны для прорастания семян расторопши. Контрольные семена помещали в воду на время, соответствующее пребыванию в воде семян при обработке давлением. Далее, все семена сразу после барообработки высаживали в открытый грунт, за исключением варианта, в котором после барообработки (10 МПа, 5 мин) семена сушили при комнатной температуре и высевали на следующий день.

По наблюдениям за экспериментальными посевами установлено, что первые всходы появились на вторые сутки после посева в вариантах с барообработкой 20 МПа, 5 минут; 10 МПа, 5 минут; 10 МПа, 10 минут и в контроле. В вариантах с барообработкой 5 МПа, 5 минут; 15 МПа, 5 минут и 10 МПа, 5 минут с последующим подсушиванием семена начали прорастать на 7-8-е сутки. Через 16 дней после посева появление всходов прекратилось. В итоге, доли проросших семян оказались следующие: 76% в варианте 10 МПа, 5 минут с последующим подсушиванием, 69% в контроле, и далее в вариантах 10 МПа, 5 минут — 50%; 20 МПа, 5 минут — 49%; 10 МПа, 10 минут — 33%; 5 МПа, 5 минут и 15 МПа, 5 минут — 31%. Таким образом, максимальное количество всходов (76%) появилось в варианте 10 МПа, 5 минут с последующим подсушиванием семян. Это, видимо, связано с обратимостью двух начальных фаз набухания семян, когда начинает возрастать осматический потенциал [2]. Следовательно, предпосевная обработка семян гидростатическим давлением с последующим подсушиваем — как фактора стресса увеличивает процент всходов семян расторопши.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-26-00346, https://rscf.ru/project/22-26-00346/.

1. Е.Э. Нефедьева, В.И. Лысак, С.Л. Белопухов. Известия Вузов. Прикладная химия и биотехнология. **6** (11), 38 (2014).

2. М.Г. Николаева, И.В. Лянгузова, Л.М. Поздова Биология семян. – НИИ Химии СПбГУ (1999).

Модель организации хроматина в ядре биологической клетки по данным малоуглового рассеяния (МУР)

Е. Яшина[1,2]*, Е. Варфоломеева[2], Р. Пантина[2], В. Байрамуков[2], Р. Ковалев[3], Н. Федорова[2], О. Шнырков[1,2], К. Пшеничный[2], V. Pipich[3], A. Radulescu[3], С.В. Григорьев[1,2]

[1]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
[2]Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
[3]Forschungszentrum Jülich - JCNS, Garching, Germany
*e–mail: yashina_91@inbox.ru

Хроматин делится на два полногеномных компартмента: «открытый» хроматин образует компартмент **A**, «закрытый» хроматин - компартмент **B**. Наиболее популярной моделью для описания крупномасштабной упаковки ДНК является модель фрактальной глобулы, предложенная Гросбергом в конце 20-ого века. Согласно этой модели нить ДНК, подобно кривой Гильберта, полностью заполняет трехмерное пространство без самопересечений, а ее размерность равна DF=3 [2]. Данная модель является хорошим приближением для описания «закрытого» хроматина (Компартмента B), массовая доля которого превалирует в ядре. Однако, эта модель, видимо, не описывает структуру «открытого» хроматина (Компартмента **A**). Эксперименты по МУРН, Ультра МУРН и Спин-Эхо МУРН на разных типах ядер: куриных эритроцитов [3], ядра HeLa [4] и крысиных лимфоцитов [5], показали, что наднуклеосомная организация хроматина представляет собой двухуровневую фрактальную структуру. Мелкомасштабный фрактальный уровень описывается моделью объемного фрактала, в то время как крупномасштабный фрактальный уровень описывается моделью логарифмического фрактала. Эксперименты по МУРР демонстрируют корреляцию транскрипционной активности ядер HeLa с наличием и размером объемно фрактальной структуры в организации хроматина. По-видимому, открытый хроматин компартмента **A** описывается структурой объемного фрактала. Обобщая результаты по МУР и принимая во внимание успех описания неактивного (закрытого) хроматина моделью фрактальной глобулы [1,2], мы предлагаем би-фрактальную модель [3-6] организации активного (открытого) хроматина, который существует на фоне неактиного хроматина, плотно и однородно заполненняющего пространство ядра. На масштабах от нескольких десятков до нескольких сотен нанометров активный хроматин формируется в структуру объемного фрактала с фрактальной размерностью равной $D_F = 2.5$, в то время, как на масштабах от нескольких сотен нанометров до нескольких микрометров (вплоть до размера самого ядра), активный хроматин образует структуру логарифмического фрактала. В классификации МУРН на фрактальных объектах, модель объемного фрактала соответствует однородной самоподобной классической фрактальной структуре, характеризующейся хаусдорфовой размерностью D_F и наблюдается в эксперименте, как убывающая степенная зависимость интенсивности рассеяния с показателем $2 < \nu < 3$ ($\nu = D_F$), в то время как модель логарифмического фрактала описывает иерархическую структуру, которая описывается логарифмической мерой и формируется согласно принципу сохранения объема при изменении масштаба. Экспериментально структура логарифмического фрактала наблюдается как кубический закон в интенсивности рассеяния. Вопрос о механизме формирования объемного и логарифмического фрактала в среде активного хроматина остается открытым.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-12-00188).

1. E. Lieberman-Aiden *et al.*, Science, **326**, 289 (2009).
2. J.D. Halverson *et al.*, Rep. Prog. Phys., **77**, 022601 (2014).
3. S.V. Grigoriev *et al.*, Physical Review E, **102**, 3, 032415 (2020).
4. S.V. Grigoriev, *et al.*, Physical Review E, **104**, 4, 044404 (2021).
5. E.G. Iashina *et al.*, Physical Review E, **104**, 064409 (2021).
6. E.G.Iashina, S.V. Grigoriev, JETP **129**, 455 (2019).

Авторский указатель

Franco V., 106
Gebara P., 85
Pipich V., 294
Radulescu A., 294
Абдулкадирова Н.З., 85
Абдуллаев Н.А., 229
Абдуллаев Ю.А., 229
Абухасва А.С., 86
Авдеев М.В., 249
Агзамова П.А., 194
Акзянов Р.Ш., 247
Аккузин С.А., 185
Акрамов Д.Ф., 123
Алантьев К.В., 223
Алексеева О.А., 191
Алигулиева Х.В., 229
Алиев А.М., 61, 85, 90, 91, 99, 106, 118
Алисултанов З.З., 62
Амиров А.А., 93
Ананченко Д.В., 254
Ангервакс А.Е., 261
Андбаева В.Н., 205, 213
Андреев С.В., 88, 94, 119
Анзулевич А.П., 186, 218
Аникеев С.Г., 184
Аникин М.С., 100
Аникина Е.В., 223, 278
Антонов Р.А., 138
Антонова О.В., 140
Артемьев М.А., 228, 234
Артемьев М.С., 87
Артюхова Н.В., 184
Асланов С.В., 237
Астанина П.Н., 287
Асташкина М.С., 255
Афонин В.В., 155, 156
Ахмедов Г.М., 229
Бадалова З.И., 229
Бадр М.Х., 86
Бадртдинов Д.И., 120
Байгутлин Д.Р., 275
Байдаков В.Г., 190
Байрамуков В., 294
Байтимиров Д.Р., 115
Балякин И.А., 273
Баранов Н.В., 109, 123, 128, 137
Безбородова П.А., 177
Беккер Т.Б., 253
Белослудцева Е.С., 124
Бельтюков Я.М., 274
Беляев А.Ю., 288, 289, 293
Беляев Д.В., 224
Блинов И.В., 182, 195
Бобин С.Б., 208
Богач А.В., 248
Боголюбский А.С., 163
Богуславский Л.Г., 88
Болотина Н.Б., 178
Борзилов В.О., 96
Бормусова С.В., 256
Боярских К.А., 206
Бражник В.В., 125
Бронникова Ю.И., 126
Брюханов А.А., 255
Букреев Д.А., 105
Бухвалов Д.В., 111
Бучельников В.Д., 104, 113, 275
Бушкова О.В., 193
Быкова А.А., 89
Варфоломеева Е., 294
Васин М.Г., 63
Васьковский В.О., 89, 114, 117, 225, 226
Ведь М.В., 98
Верясова А.А., 225
Власов Р.В., 127
Возгорькова Е.А., 255, 256
Волегов А.С., 94, 119, 137
Волков А.Ю., 140
Волосников Д.В., 207, 211
Волочаев М.Н., 184
Воронин А.И., 168, 241
Гаврилкин С.Ю., 245
Гаврилов Н.В., 115
Гаврилова А.А., 140
Гаджиалиев М.М., 90
Гаджиев А.М., 90
Галимзянов Б.Н., 188, 283
Галиуллин А.А., 157

Гамзатов А.Г., 85, 91, 99
Герасимов М.Ф., 254
Гермизина А.А., 92, 235
Гермов А.Ю., 173
Глухов К.И., 194
Говорина В.В., 93
Голикова М., 158
Голобородский Б.Ю., 173
Голованова А.И., 159
Головня О.А., 101
Голубятникова А.А., 94, 119
Горбачев И.И., 130
Гордеев Н.В., 199, 201
Горьковенко А.Н., 89, 114, 117, 225, 226
Гревцева И.Г., 255, 256
Григорьев П.Д., 161
Григорьев С.В., 64, 294
Гридчина В.М., 178
Гудин С.А., 65
Гудина С.В., 162, 163, 165, 169
Гуляев К.Е., 95
Гусейнов М.М., 257
Давыдов Д.И., 179
Данилов Д.В., 132
Дворецкий С.А., 157
Дегтяренко А.Ю., 245
Дегтяренко П.Н., 245
Деревянко М.С., 105
Дерепко В.Н., 255
Десятников И.А., 87, 228, 234
Долгих В.Е., 259
Дорохин М.В., 98
Дрягина А.Е., 225, 226
Дубинин С.С., 87, 228, 234
Дудин Ю.А., 98
Дьячков Е.Г., 78, 180, 181
Дьячкова Т.В., 230
Дёмин А.М., 66
Дёмина П.Б., 98
Евсин Д.В., 96
Елистратов А.А., 67, 74
Елфимова В.Ю., 280
Ерагер К.Р., 275
Естюнин Д., 231
Жидков И.С., 263, 264
Жуманазаров А.П., 227
Заворницын Р.С., 97
Загребин М.А., 104
Зайцев Е.Ю., 219
Зайцева П.В., 240
Захаров М.С., 246
Зацепин А.Ф., 115, 230
Заякин О.В., 68
Заяц С.В., 217
Здоровейщев А.В., 98
Здоровейщев Д.А., 98
Зинин А.В., 100
Иванов В.Е., 88
Иванов В.Ю., 260, 261
Иванова А., 158
Игнатенко А.Н., 276
Игошев П.А., 277
Изюров В.В., 87, 228, 234
Ирхин В.Ю., 164, 276
Истомина А.Ю., 182, 192, 195
Йонссон Х., 110
Кадетова А.В., 258, 266
Кадырбардеев А.Т., 99
Казанцев В.А., 137
Калганов Д.А., 183, 186, 218
Камаева Л.В., 76, 126, 134
Каманцев А.П., 69, 118, 138
Камилов К.И., 85
Кантур И.Э., 259
Каплун М.В., 278
Капранов А.В., 247
Карпов И.В., 166, 250
Карпухин Д.А., 69
Катанин А.А., 277
Кафтаранова М.И., 184
Кахраманов С.Ш., 229
Квашнин А.Г., 187
Ким А.В., 185
Киряков А.Н., 115, 230
Кислов Е.В., 128
Климовских И.И., 231
Князев М.И., 100
Ковалев Р., 294
Коваленко Л.Ю., 186, 218
Кокурин М.Ю., 236
Коледов В.В., 69, 132, 138
Колодкин Д.А., 101
Комарова В.А., 129
Комленок М.С., 232

Коморников В.А., 191
Конев А.С., 173
Конев С.Ф., 115
Конюх Д.А., 274
Коплак О.В., 287
Коренистов П.С., 164
Корзунова Е.И., 130
Королев А.В., 70
Корх М.К., 200
Корх Ю.В., 260
Котов А.Н., 208
Котомина В.Е., 98
Кочнев А.В., 200
Кравцов Е.А., 117, 238
Красников В.С., 177
Кругликов Н.А., 288, 289, 291–293
Крутиков В.И., 219
Кручинина К.А., 101
Кугель К.И., 281
Кудюков Е.В., 226
Кузнецов Д.Д., 132, 192
Кузнецов Д.К., 123
Кузнецова А.Ю., 131, 139
Кузнецова Е.И., 132
Кузнецова Т.В., 224, 259–261
Кукушкин И.В., 82
Кулеш Н.А., 89, 225, 226
Кунцевич А.Ю., 71, 157
Курбаков А.И., 116
Курбанова Д.Р., 133
Курляндская Г.В., 112
Курмаев Э.З., 263, 264
Курмачев И.А., 173
Курочицкий Н.Д., 232
Кухаренко А.И., 263, 264
Кушнерева Д.С., 185
Ладьянов В.И., 126
Ларионов И.А., 290
Латыпов Т.И., 134
Лебедев А.М., 267
Лепаловский В.Н., 88, 114, 117
Лигус А.А., 102
Липнягов Е.В., 209, 210
Литовченко И.Ю., 185
Лобанов А.Д., 260
Лобанов И.С., 110
Лошаченко А.С., 132
Лупицкая Ю.А., 159
Лысов М.С., 95
Льготина Д.А., 135
Магомедов М.А., 133
Мазуренко В.В., 111, 120
Мазуренко В.Г., 111, 120
Майер А.Е., 177
Макаров Д.В., 143
Макарова А.С., 269
Макарова М.В., 97
Макеев М.Ю., 103, 233
Максимова И.К., 92, 235
Мальцева В.Е., 94, 119
Мамазакиров О.Р., 184
Мамонова М.В., 96, 103, 146, 233
Манцевич В.Н., 72
Маренкин С.Ф., 90
Марченков В.В., 164, 167
Марченкова Е.Б., 164, 167
Маслова Н.С., 72
Маслова С.А., 261
Матюнина М.В., 104
Мацокин Н.А., 187
Мацюк И.М., 105
Маширов А.В., 118, 132
Меренцов А.И., 78, 160, 193, 262, 267, 268
Меренцова К.А., 87, 228, 234
Мехоношин Д.С., 95
Миляев М.А., 92, 97, 235
Минькова А.В., 136
Михайлов Н.Н., 157
Могилюк Т.И., 161
Мозговых С.Н., 129, 137
Мокшин А.В., 127, 147, 148, 188, 283
Морозов Е.В., 138
Моругин Е.С., 183
Москалев М.Е., 114, 117
Мостовщикова Е.В., 141, 142
Муравьев В.М., 82
Мурзашев А.И., 227, 236
Мурзинова С.А., 182, 192, 195
Муртазаев А.К., 133
Муртазаев К.Ш., 133
Мустафа М., 86
Мухучев А.А., 106
Найданов И.А., 235
Наумов С.В., 167

Наумова Л.И., 92, 97
Неверов В.Н., 162, 163, 165, 169
Незнахин Д.С., 93
Некрасов Е.С., 102, 107
Некрасов И.А., 73, 279
Никифоров Г.А., 188
Никифоров С.В., 254
Ничипурук А.П., 201
Новикова О.С., 140
Новицкий А., 158
Новицкий А.П., 168, 241, 242
Новокрещенов Д.В., 108
Носов А.П., 87, 228, 234
Носова Н.М., 109
Овчаров А.В., 245
Огнев А.В., 239
Огурцов А.В., 101
Онищенко А.О., 139
Оруджова Х.В., 229
Павлов Д.А., 218
Павлов Н.С., 279
Павлова А.Ю., 92, 235
Паймеров С.К., 236
Пакулов А.О., 162
Палатников М.Н., 258, 266
Памятных Л.А., 95
Панов Д.Ю., 183
Панов Ю.Д., 152
Пантина Р., 294
Паранин С.Н., 217, 219
Паршакова М.А., 209, 210
Патраков Е.И., 260
Пахолкина С.А., 184
Перваков К.С., 279
Перевалова А.Н., 167
Перепелица А.С., 237
Петров В.Ю., 156
Печищева Н.В., 240
Пивоваров П.А., 232
Поволоцкий И.И., 207, 211
Подгорбунская П.О., 140
Подгорных С.М., 167
Попов А.Г., 101
Постников М.С., 78, 139, 144, 145, 180, 189, 262, 267, 268
Поткина М.Н., 110
Проглядо В.В., 92, 97, 235
Прокопьев Д.А., 173
Протасов А.В., 101
Проценко С.П., 190
Процив С.Д., 291
Прошин Ю.Н., 249
Прудников П.В., 96, 135, 136, 150, 151
Прусский А.И., 258, 266
Пряничников С.В., 160, 189, 267
Пушин В.Г., 124
Пушкарев Г.В., 111, 120
Пшеничный К., 294
Пыжьянов Я.Я., 141, 142
Рамазанов М.К., 133
Раммах Ю.С., 86
Расметьева А.В., 263, 264
Растрепенина Н.С., 95
Рахманов А.Л., 247
Ремизов С.В., 74
Рempель А.А., 240
Реснина Н.Н., 75
Ригмант М.Б., 200
Риль А.И., 90
Розанов Е.О., 190
Руденко А.Н., 120
Русалина А.С., 97, 112
Русских П.А., 220
Рыбин М.Г., 232
Рыжова А.А., 238
Рыльцев Р.Е., 76, 80, 273, 282
Рыскин А.И., 261
Сайпулаева Л.А., 90
Самардак А.С., 239
Самарин А.Н., 248
Самарин Н.А., 248
Сандаков Н.С., 163
Саносян А.А., 113
Сарычев М.Н., 260
Свалов А.В., 112
Северова С.В., 114
Селезнева Н.В., 109, 123, 128, 129, 137
Семянникова А.А., 164
Сергиенко И.А., 168, 241, 242
Середкин Н.Н., 212
Сидорова Е.В., 191
Силова А.Е., 159
Сираев Ф.М., 249
Ситдиков Л.В., 115

Скрипов П.В., 207, 211
Скулкина Н.А., 102, 107
Смирнова Е.С., 191
Соболевский О.А., 157
Соколовский В.В., 99, 104, 108, 113, 275
Сокольчик Д.П., 143
Соломонов В.И., 269
Сорокина К.А., 256
Спиридонов В.А., 183
Спирин А.В., 217, 219
Спирина А.В., 269
Старостин А.А., 208
Сташков А.Н., 199, 201
Сташкова Л.А., 93
Стеблий М.Е., 239
Стерхов Е.В., 142
Столбовский А.В., 182, 192, 195
Стрельцов С.В., 280, 281
Стрижак П.А., 214
Стукалов В.Ю., 124
Суворкова Е.В., 173
Сумников С.В., 145
Суржиков Е.А., 239, 265
Суслов Е.А., 131, 139, 144, 145
Суслопарова А.Е., 116
Сухачев Р.А., 146
Сухоруков Ю.П., 265
Сушникова А.А., 240
Таран Л.С., 280
Таранов Д.В., 101
Тарасенко С.А., 77
Тарасов Е.Н., 100
Телегин А.В., 141, 239, 265
Темников Ф.В., 281
Терентьев П.Б., 164
Терентьев Ю.А., 69
Типеев А.О., 282
Титов А.А., 78, 144, 181, 189
Титов А.Н., 78, 131, 139, 144, 145, 180, 181, 189, 262, 267, 268
Титова С.Г., 142
Токко О.В., 258, 266
Трошин П.А., 263, 264
Туруткин К.В., 162, 163, 165
Тютюнник А.П., 230
Урусова Н.В., 193
Устинов В.В., 97
Устинова М.И., 263, 264
Ушаков А.В., 166, 250
Фалахутдинов Р.М., 182, 192, 195
Фархутдинов А.Р., 147
Федоров Л.Ю., 166, 250
Федорова Н., 294
Фещенко А.А., 88, 114, 117
Фоминых Б.М., 167
Хабибуллин Р.А., 148
Хазиева Е.О., 282
Хайруллина Р.Р., 149
Ханина А.С., 242
Ханов Л.Н., 118
Хассан М.А., 86
Хищенко К.В., 79, 206, 212
Ховайло В.В., 158, 168, 241, 242
Ходоренко В.Н., 184
Хомский Д.И., 281
Хотиенкова М.Н., 213
Хрыкина О.Н., 178
Хуснутдинов Р.М., 149, 196
Цветков А.Ю., 245
Цыбенко Ф.А., 237
Цыганков А.А., 283
Чернышев В.А., 194
Чернышова Е.В., 168, 241
Чикунова Н.С., 182, 192, 195
Чирков К.С., 256
Чистяков В.В., 167
Чолах С.О., 263, 264
Чумаков Р.Г., 267
Шабалина А.В., 184
Шаваров С.Ю., 292
Шавров В.Г., 132, 138
Шакиров Р.С., 150
Шалагинов А.Н., 94, 119
Шангин В.В., 208
Шандрюк Г.А., 132
Шарин М.К., 101
Шарова Е.А., 289, 293
Шеин И.Р., 279
Шеляков А.В., 138
Шерокалова Е.М., 129, 137
Шикин А.М., 231
Шитов А.В., 101
Шишкин М.А., 169
Шкварин А.С., 78, 180, 181, 262, 267, 268

Шкварина Е.Г., 78, 160, 180, 267
Шкляев К.Я., 63
Шлегель Н.Е., 214
Шляхтич М.А., 151
Шныpков О., 294
Штанг Т.В., 254
Щапова Е.А., 199, 201
Щапова Ю.В., 115, 230
Щелкачев Н.М., 76, 80, 134, 282
Щербакова К.А., 242
Эль-Хамалави А.А., 86
Юнусов М.Б., 196
Яковлев И.А., 120
Якунин М.В., 163
Яландин М.И., 81
Ярмошенко Ю.М., 259, 261
Ярошенко Ф.А., 159
Ясинская Д.Н., 152
Яшина Е., 294

Тезисы докладов
XXII Всероссийской школы-семинара
по проблемам физики конденсированного состояния вещества
памяти М.И. Куркина
г. Екатеринбург, 24 ноября — 1 декабря 2022 г.

ISBN 978-5-6045774-6-2

9 785604 577462

УДК 538.9(043.2))
ББК 22.37я431

Материалы школы-семинара
публикуются в авторской редакции

Технический редактор — П.А. Игошев
Верстка — П.А. Игошев, Д.И. Радзивончик,
Н.С. Павлов, А.С. Панасенко
Дизайн обложки и фотография — Н.Н. Гапонцева
Ответственные за выпуск — С.А. Гудин, А.Н. Сташков
Отпечатано на ризографе ИФМ УрО РАН
Печать обложки — участок оперативной полиграфии УрО РАН
Тираж печатной версии 70 экз.

ИФМ УрО РАН
620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
тел. (343) 378-38-65
e–mail: spfks@imp.uran.ru