

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

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

СБОРНИК ТРУДОВ
международной конференции,
посвященной 300-летию Российской академии наук



10-15 сентября 2023 г.

Махачкала

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

**Сборник трудов международной конференции
10-15 сентября 2023 г., Махачкала**

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

Конференция проводится Институтом физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Дагестанским государственным университетом, Челябинским государственным университетом.

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

© Институт физики Дагестанского ФИЦ РАН, 2023.

УДК 537.61

ББК 22.334

Ф16

ISBN 978-5-00212-314-8

DOI: 10.33580/9785002123148

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

- Сопредседатели:** чл.-корр. РАН Камилов И.К., Махачкала, Россия
чл.-корр. РАН Муртазаев А.К., Махачкала, Россия
- Зам. председателя:** Ашурбеков Н.А., Махачкала, Россия
Каллаев С.Н., Махачкала, Россия
- Секретарь:** Абакарова Н.С., Махачкала, Россия

Члены оргкомитета

академик РАН Асхабов А.М., Сыктывкар, Россия
академик РАН Бражкин В.В., Троицк, Россия
академик РАН Кведер В.В., Черноголовка, Россия
академик РАН Садовский М.В., Екатеринбург, Россия
чл.-корр. РАН Арсеев П.И., Москва, Россия
чл.-корр. РАН Борисов А.Б., Екатеринбург, Россия
чл.-корр. РАН Хохлов Д.Р., Москва, Россия
Абдулагатов И.М., Махачкала, Россия
Батаев Д.К.-С., Грозный, Россия
Бучельников В.Д., Челябинск, Россия
Вахитов Р.М., Уфа, Россия
Воронцов-Вельяминов П.Н., Санкт-Петербург, Россия
Звездин А.К., Москва, Россия
Кугель К.И., Москва, Россия
Рабаданов М.Х., Махачкала, Россия
Рыжов В.Н., Троицк, Россия
Таскаев С.В., Челябинск, Россия
Терешина И.С., Москва, Россия
Шавров В.Г., Москва, Россия

ЛОКАЛЬНЫЙ И ПРОГРАММНЫЙ ОРГКОМИТЕТ

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

Содержание

Пленарные доклады.....	5
Секция А1. Моделирование фазовых переходов и критических явлений.....	25
Секция Б2. Общие вопросы физики фазовых переходов и критических явлений.....	77
Секция В2. Топологические материалы, магнитотранспорт и спинтроника.....	145
Секция А3. Материалы с памятью формы, магнитокалорические материалы, мультиферроики	195
Секция Б3. Нелинейные явления и хаос в конденсированных средах.....	238
Авторский список.....	297

Пленарные доклады

Модели Поттса с замороженным беспорядком

Муртазаев А.К.^{1,2}, Бабаев А.Б.^{1,3}

¹ *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*

e-mail: akai2005@mail.ru

² *Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*

³ *Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия*

К статистическим неупорядоченным решеточным моделям Поттса до настоящего времени сохраняется огромный интерес. Это связано с тем, что рассматриваемые модели с замороженным беспорядком описывают многие явления и объекты, встречающиеся в физике конденсированных сред. Ряд физических систем описывается гамильтонианами, имеющими те же свойства симметрии, что и неупорядоченные модели Поттса, и, принадлежащими к тому же классу универсальности критического поведения [1].

К настоящему моменту, в понимании особенностей влияния замороженного беспорядка, реализованного как в виде немагнитных примесей, случайных связей, так и в виде случайных магнитных полей [2] на критическое поведение магнитных систем, достигнут существенный прогресс. Однако, в отличие от влияния замороженного беспорядка на непрерывные фазовые переходы (ФП) гораздо меньше известно о его влиянии на ФП первого рода. В частности, имеются основания предполагать, что беспорядок может оказать совершенно другое влияние вплоть до изменения рода ФП в случае спиновых систем, испытывающих в однородном состоянии ФП первого рода [2, 3]. Определение точных значений концентраций немагнитных примесей c , $c=1-p$, где p – концентрация спинов, при которых в рассматриваемых системах могут заметно изменяться их физические свойства имеет большое значение при создании различных новых магнитных материалов. Наиболее подходящими моделями для проверки влияния замороженного беспорядка на различные свойства магнитных систем являются модели Поттса [1].

В рассматриваемой работе изучено влияние немагнитного беспорядка на ФП первого рода исходя из данных вычислительного эксперимента для моделей Поттса. Анализируя магнитные конфигурации для двумерных и трехмерных моделей Поттса с числом состояний спина $2 < q \leq 4$ и для $q \geq 4$ показано, что немагнитный беспорядок препятствует сосуществованию фаз характерных для фазового перехода первого рода.

[1] F.Y. Wu, *Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics*. World Scientific, London (2009).

[2] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, *JMMM* **563**, (2022).

[3] M. Aizenman, J. Wehr, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503 (1989).

О природе аномальной кинетики роста кристаллов гелия

Асхабов А.М.

*Институт геологии им. академика Н.П.Юшкина ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,
Сыктывкар, Россия
e-mail: askhabov@geo.komisc.ru*

Кристаллогенетический интерес к гелию связан необычностью самого факта его кристаллизации. Гелий, как известно, даже вблизи абсолютного нуля температуры кристаллизуется только под давлением. Чем выше температура, тем большее давление требуется для его кристаллизации. Эксперименты по кристаллизации гелия интересны и тем, что они проводятся при температурах ниже точки сверхтекучего перехода. В этом случае теплопроводность жидкого гелия велика, а вязкость практически нулевая, что сводит на нет роль транспортных эффектов в росте кристаллов.

В 2015 году была опубликована обзорная статья ВЛ. Цымбаленко [1] с характерным названием «Удивительный рост граней кристалла гелия» с подробным изложением и анализом экспериментальных данных по кинетике кристаллизации гелия. Главные интригующие результаты сводились к следующему:

1. С увеличением степени неравновесности наблюдается резкое скачкообразное увеличение скорости роста на два – три порядка независимо от наличия или отсутствия источников роста (ростовых дефектов на растущих гранях). Такой аномальный (взрывоподобный) рост невозможно объяснить в рамках классических представлений.

2. В отсутствие на грани источников роста в виде выходов винтовых дислокаций имеет место так называемый сверхмедленный рост грани. Кристаллы растут аномально медленно, что также непонятно и вызывает удивление.

Поскольку речь идет о кристаллах гелия, растущих при температурах ниже точки сверхтекучего перехода, то влияние транспортных процессов и тепловых эффектов на кинетику роста должно быть ничтожно малым. Это же относится к роли теплоты кристаллизации гелия в этих условиях. Поэтому эти процессы не могут нести ответственность за наблюдаемые эффекты.

Попытки объяснить особенности роста граней кристаллов гелия через изменение их поверхностных свойств также не привели к успеху. Этому, в частности, противоречило то обстоятельство, что скорости роста плоских граней и изначально атомно-шероховатых поверхностей менялись с увеличением пересыщения одинаковым образом. Существенно и то, что нет большой разницы при переходе в быстрорастущее состояние кристаллографически разных граней.

В статье [1] на основе анализа всей совокупности экспериментально установленных фактов уже был сделан обоснованный вывод о

невозможности объяснения эффекта взрывоподобного роста кристаллов кинетическими факторами (поверхностными механизмами). Поэтому от механизмов, которые связывали резкое увеличение скорости роста атомно гладких граней (причем одновременно всех граней сразу) с поверхностными процессами, попытались перейти к моделям, в которых предполагается изменение собственно самого объемного состояния растущего кристалла с изменением условий роста (с переходом кристалла в особую аномальную фазу). Однако относительно возникающего нового состояния кристалла сказать, что либо определенное и тогда и сейчас невозможно.

Нам представляется, что обсуждаемые здесь действительно удивительные особенности роста граней кристалла гелия могут быть достаточно просто объяснены, если мы воспользуемся для этого представлениями о неклассическом механизме роста кристаллов. Согласно этим представлениям для роста кристаллов решающее значение имеют не структура поверхности и не транспортные эффекты, а природа и размеры формирующих кристалл строительных единиц.

Ниже сделана попытка интерпретации эффектов аномального роста кристаллов гелия в рамках так называемой кватаронной концепции неклассического роста кристаллов [2].

Ключевое положение этой концепции – образование в кристаллообразующей среде в условиях пересыщения наноразмерных кластеров, названных кластерами «скрытой» фазы или кватаронами. Они не являются зародышами новой фазы, которые фигурируют в классической теории зародышеобразования. Это особые нанокластеры с необычными свойствами. Их всё чаще рассматривают как особую форму структурной организации вещества на наноуровне, для которой не существует макроскопических аналогов.

В общем случае кватароны – это предкристаллизационные кластеры. Они образуются и могут устойчиво существовать только в неравновесных условиях. Кватароны обладают динамической структурой, отличаются от обычных энергетически минимизированных и пространственно-оптимизированных классических кластеров, им присущ определенный жидкостно-твердофазный дуализм. Свойства кватаронов как и всех других наноразмерных объектов зависят от их размеров, которые в свою очередь зависят от пересыщения. При больших пересыщениях это уже объекты очень близкие по своей структуре к кристаллам. В минералогии подобные образования были названы протоминералами [3].

В кристаллогенетическом плане кватароны идеально подходят на роль строительных единиц при росте кристаллов. Но при этом они в неизменном виде не строят кристалл. Их полная адаптация к структуре кристалла происходит уже на самой растущей поверхности. Послойный механизм роста граней кристалла обеспечивается путем трансформации кватаронов в двумерные зародыши на грани.

Если предположить, что присущая для кристаллообразующих сред в пересыщенном состоянии неизбежная кластеризация в каком-то виде имеет место и для жидкого гелия вдали от равновесия, то это обстоятельство может многое прояснить в аномалиях роста кристаллов гелия. В настоящее время предположение об определенной кластеризации применительно к гелию носит умозрительный характер из-за невозможности получения экспериментальных доказательств. Обычные методы, в том числе и криоэлектронная микроскопия, которые часто используются для регистрации кластеров в жидких средах, в случае гелия не могут быть использованы. Однако, известно об устойчивом существовании кластеров гелия, образующихся при истечении газа из охлаждаемого сопла или в результате фрагментации жидкости, а также о возникающих в жидком гелии пространственных неоднородностях даже в условиях равновесия. Сообщалось также об образовании примесных нанокластерных структур в жидком гелии [4]. Так что явление типа предкристаллизационной кластеризации для гелия вполне возможно. В сущности, предположение о кластеризации означает всего лишь то, что характерная для жидкости единая сетка связанных атомов с ростом пересыщения нарушается и она как бы разбивается на отдельные кластеры (кватароны в нашей терминологии). По существу, в слабо связанной жидкости гелия они будут представлять собой области с чуть большей, чем окружающая среда, плотностью.

С учетом предполагаемых особенностей наноструктурной организации кристаллообразующей среды можно объяснить обнаруженные кинетические особенности роста кристаллов гелия, в частности связанный с пересыщением феномен резкого изменения скоростей их роста. Можно предположить, что при росте пересыщения (*overpressurization*), задаваемого в условиях эксперимента превышением давления над давлением фазового равновесия, происходит кластеризация среды. Кватароны образуются в «чистом» виде как объекты, в которых атомы связаны лишь ван-дер-ваальсовыми связями. Примеси, которые могли бы вызвать гетерогенное зарождение отсутствуют. Присоединение кватаронов к кристаллу, регулируется решеткой кристалла, а их размер отвечает за скорость роста. Предельное пересыщение, которое может привести к затвердеванию гелия в аморфном состоянии, в экспериментах не достигается. Кинетическое сопротивление для включения в решетку кристалла атомов, соприкасающихся с ним кватаронов минимально. В результате создаются условия для реализации так называемого практически безбарьерного роста кристалла, в том числе и для случая, когда рост осуществляется через образование кватаронами двумерных зародышей на гранях. В определенной степени это напоминает известную взрывную кристаллизацию аморфных веществ [5]. Этому в значительной степени способствуют и то, что при больших пересыщениях исчезает разница между структурой кристалла и структурой кластера. Вдали же от равновесия в кластеризованной среде кристаллизация кватаронов на растущей поверхности ведет к

последовательной кристаллизации других по принципу домино, что и приводит к скачкообразному возрастанию скорости роста.

Быстрый рост кристалла неизбежно приведет к уменьшению пересыщения в системе и последующему переходу в стадию медленного роста, а при истощении пересыщения – к остановке роста. Для совершенной грани реализуется сверхмедленный рост, поскольку образование двумерных зародышей из-за отсутствия соответствующих кластеров также становится затруднительным. Сверхмедленный рост обеспечивают лишь одиночные атомы, попадающие на грань кристалла. На самом деле это как раз и есть нормальный рост совершенной грани по классическому механизму Косселя-Странского. Непрерывный аномально быстрый рост будет возможен, если удастся создать постоянно высокое пересыщение, что практически очень трудно сделать. Важно отметить и то, что любые факторы, влияющие на безбарьерный характер роста кристаллов, будут отражаться на кинетике их роста. К примеру возрастание температуры, и введение изотопических примесей уменьшают скорости роста граней.

Таким образом согласно нашей модели – рост кристаллов гелия в зависимости от пересыщения может происходить в следующих трех непротиворечащих экспериментальным данным режимах:

а) сверхмедленный рост, отвечающий атомарному классическому механизму по модели Косселя (при весьма малых пересыщениях),

б) нормальный рост – это рост по кватаронному механизму послыонного роста (малые и средние пересыщения),

в) аномальный взрывоподобный рост – рост в кластеризованной среде по цепному механизму (высокие пересыщения).

В данной модели аномально быстрый рост реализуется независимо от наличия или отсутствия дефектов на растущих гранях. Эффект будет проявляться одновременно на всех кристаллографически разных гранях и ориентациях поверхности кристалла. Значение имеет только достижение критического пересыщения, необходимого для кластеризации в окружающей среде. Принципиально и то, что мы уходим от всех предлагавшихся ранее объяснений явления аномального роста кристалла гелия. Сформулированный в [1] фундаментальный вопрос – «поверхность или объем?» имеет ответ за пределами этой дилеммы. Дело вовсе не в процессах, происходящих на растущей поверхности и не в формировании нового состояния кристалла под воздействием пересыщения, а в свойствах пересыщенного состояния жидкого гелия и связанных с ними особенностей роста кристаллов.

[1] В.Л. Цымбаленко // УФН. **185**. 1163 (2015).

[2] А.М. Асхабов // Зап. ВМО. **148**. (2019).

[3] А.М. Асхабов // Изв. Коми НЦ УрО РАН. **46**, 21 (2020).

[4] Л.П. Межов-Деглин // УФН. **175**. 1109. (2005).

[5] В.А. Шкловский, В.М. Кузьменко // УФН. **157**. 311. (1989).

Модель Китаева и китаевские материалы

Стрельцов С.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

e-mail: streltsov@imp.uran.ru

В последнее десятилетие одной из наиболее “горячих” областей в физике конденсированного состояния стало изучение китаевских магнитных систем, в которых обменное взаимодействие оказывается сильно анизотропным и направление анизотропии является различным для разных связей в решетке [1]. Наличие анизотропии обусловлено особой геометрией решетки и сильным спин-орбитальным взаимодействием. Первоначально основной интерес был сконцентрирован на оксидах $4d - 5d$ переходных металлов, но позднее в работах [2,3] было показано, что и в некоторых соединениях $3d$ элементов, например, кобальтатах (на основе Co^{2+}), возможны подобные эффекты.

В данном докладе будет сделан обзор текущей ситуации в данной области, а также представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований таких соединений как $BaCo_2(AsO_4)_2$ [4], $Na_3Co_2SbO_6$ [5], $SrCoGe_2O_6$ [6] и некоторых других систем.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, проект РНФ 23-12-00159.

- [1] S.V. Streltsov, D.I. Khomskii, *Physics-Uspekhi* **60**, 1121 (2017).
- [2] R. Sano, Y. Kato, and Y. Motome, *Phys. Rev. B* **97**, 014408 (2018).
- [3] H. Liu and G. Khaliullin, *Phys. Rev. B* **97**, 014407 (2018).
- [4] P. A. Maksimov, A.V. Ushakov, Z.V. Pchelkina, Y. Li, S.M. Winter, and S.V. Streltsov, *Phys. Rev. B* **106**, 165131 (2022).
- [5] E. Vavilova, T. Vasilchikova, A. Vasiliev, D. Mikhailova, V. Nalbandyan, E. Zvereva, and S.V. Streltsov, *Physical Review B* **107**, 054411 (2023).
- [6] A. Podlesnyak, A.V. Ushakov, A. Gubkin, P. A. Maksimov, G. Redhammer, and S.V. Streltsov unpublished

Устойчивость, коллапс и нуклеация двумерных и трехмерных топологических магнитных солитонов

Уздин В.М., Поткина М.Н., Лобанов И.С.

Физический факультет, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 191002, Россия

e-mail: v_uzdin@mail.ru

Магнитные скирмионы, антискирмионы, хопфионы, геликнотоны и другие двумерные и трехмерные локализованные структуры представляют особый интерес для фундаментальной теории магнетизма, поскольку здесь проявляется глубокая связь между топологией и физикой. Вместе с тем они служат основой для новых технологий магнитной памяти, машинного обучения, нейроморфных вычислений.

Одним из ключевых в спинтронных приложениях, например, беговой магнитной памяти, является вопрос об устойчивости топологических солитонов относительно тепловых флуктуаций, случайных внешних воздействий и требовании неизменности магнитного состояния с течением времени [1]. С другой стороны, в устройствах, использующих магнитные степени свободы, как правило, происходят процессы переключения магнитных элементов, приводящие к изменению физических характеристик системы. Частые магнитные переходы приводят к тому, что общее потребление энергии определяется эффективностью управления этими процессами. Это вызывает интерес к исследованию механизмов быстрой перестройки спинов, приводящей к формированию специфических упорядоченных магнитных структур или их распаду [2].

Задача анализа устойчивости магнитных состояний при учете тепловых флуктуаций связана с проблемой «редких событий». Теоретически, учесть тепловые флуктуации можно, решая стохастические уравнения движения для магнитных моментов, составляющих систему. Однако, оказывается, что характерная частота осцилляций отдельных магнитных моментов при температурах, представляющих практический интерес, на 10-15 порядков выше, чем частота магнитных переходов всего состояния как целого. Оценка времен жизни состояний на основе моделирования динамики и стандартных методов Монте-Карло не представляется возможным, но иерархия временных масштабов позволяет здесь использовать статистический подход, основанный на теории переходного состояния для магнитных степеней свободы [1].

Этот метод предполагает построение энергетической поверхности рассматриваемой системы, как функции всех переменных, однозначно определяющих магнитную конфигурацию, например, углов, задающих направления всех магнитных моментов. Далее следует поиск на энергетической поверхности локальных минимумов, отвечающих основному и метастабильным состояниям, и путей с минимальным

перепадом энергии (ПМПЭ) между ними, описывающих наиболее вероятные сценарии переходов. Максимальная энергия вдоль ПМПЭ определяет энергетические барьеры между состояниями, а форма энергетической поверхности вблизи минимумов и седловых точек первого порядка – предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса для времен жизни состояний. В случае, когда форма энергетической поверхности вблизи экстремумов аппроксимируется квадратичной функцией по всем переменным, предэкспоненциальный фактор можно выразить явно, через детерминанты гессианов энергии в соответствующих точках. Отметим, что размерность энергетической поверхности, даже для квазидвумерных систем, может составить десятки миллионов [3]. Поиск ПМПЭ, седловых точек и расчеты детерминантов матриц такой размерности являются сложными задачами и требуют разработки специальных вычислительных методов и алгоритмов [4]. Однако, эти методы позволяют в рамках единого подхода рассчитывать частоту распадов не только скирмионов в тонких пленках, но и трехмерных системах: скирмионов в синтетических антиферромагнетиках [5], магнитных хопфионов [6] и геликотонов [7] в массивных образцах при произвольных температурах и внешних полях.

Возможны разные сценарии коллапса, например исчезновение структуры топологического солитона внутри образца, вдали от границы образца или его уход через границу. Несмотря на наличие топологических индексов – величин, не меняющихся при непрерывном изменении намагниченности – барьер в квазинепрерывном пределе, когда размер структуры становится много больше постоянной решетки, оказывается во всех случаях конечным. При этом предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса может существенно меняться при приближении к непрерывному пределу, что объясняет устойчивость скирмионов микронного масштаба при комнатной температуре [3]. К изменению времен жизни магнитных состояний приводит наличие примесей, структурных дефектов, ограниченных размеров образца. Это проявляется через модификацию энергетической поверхности, а следовательно, и ПМПЭ, барьеров и предэкспоненциального фактора.

Для исследования вопроса о нуклеации топологических солитонов в качестве начального состояния выбирается топологически тривиальное однородное состояние, а в качестве конечного – соответствующий топологический солитон. ПМПЭ оказывается тем же, что и для распада, а барьеры – разные из-за разной энергии начального состояния. Баланс частот процессов нуклеации и коллапса топологических солитонов позволяет найти их равновесную концентрацию при заданной температуре. При этом нужно учитывать, что зародиться локализованные состояния могут в любой точке, а распаться только там, где они уже были [8].

Изменение температуры и внешнего магнитного поля приводит к нарушению установившегося между нуклеацией и коллапсом равновесия. Это позволяет рожать и уничтожать топологические магнитные солитоны в определенной точке пространства посредством локальных воздействий, например, при протекании тока с иглы туннельного микроскопа [3].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00632, <https://rscf.ru/project/22-22-00632/>

- [1] И.С. Лобанов, М.Н. Поткина, В.М. Уздин, Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано- и микроструктур (Миниобзор). Письма в ЖЭТФ, **113**, 833 (2021).
- [2] N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J.E. Bickel, B. Wolter, K. von Bergmann, A. Kubetzka, R. Wiesendanger Writing and deleting single magnetic skyrmions. *Science*, **341** (6146), 636 (2013).
- [3] M.N. Potkina, I.S. Lobanov, V.M. Uzdin, Stability of magnetic skyrmions: Systematic calculations of the effect of size from nanometer scale to microns *Phys. Rev. B* **107**, 184414 (2023).
- [4] I.S. Lobanov, V.M. Uzdin, The lifetime of micron scale topological chiral magnetic states with atomic resolution, *Comp. Phys. Commun.*, **269**, 108136 (2021).
- [5] К. В. Воронин, И. С. Лобанов, В. М. Уздин, Энергия активации и механизмы коллапса скирмионов в синтетических антиферромагнетиках. Письма в ЖЭТФ, **116**, 242 (2022).
- [6] I.S. Lobanov, V.M. Uzdin, Lifetime, collapse, and escape paths for hopfions in bulk magnets with competing exchange interactions. *Phys. Rev. B* **107**, 104405 (2023).
- [7] V.M. Kuchkin, N.S. Kiselev, F.N. Rybakov, I.S. Lobanov, S. Blügel, V.M. Uzdin, Heliknoton in a film of cubic chiral magnet. *Front. Phys.* **11**:1201018 (2023).
- [8] M.N. Potkina, I.S. Lobanov, V.M. Uzdin, Nucleation and collapse of magnetic topological solitons in external magnetic field. *Nanosyst.: phys, chem, math.* **14**, 216 (2023).

Сравнительное исследование магнитокалорического эффекта прямым и косвенными методами в соединениях RCO_2

Терёшина И.С.

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

e-mail: tereshina@physics.msu.ru

Соединения с общей формулой RCO_2 (где R – редкоземельный металл (РЗМ) или их смесь из двух и более металлов) на протяжении многих лет привлекают внимание ученых, благодаря достаточно простой кристаллической и магнитной структуры, а также рядом важнейших функциональных свойств, таких как магнитокалорический эффект (МКЭ), магнитострикция, магнитосопротивление и др. [1]. Упомянутые эффекты данные соединения проявляют, главным образом, в области температуры Кюри, которая варьируется в зависимости от типа РЗМ в широком температурном интервале от 4 К (для $TmCo_2$) до 420 К (для $GdCo_2$). Род магнитного фазового перехода (первый или второй) также зависит от типа редкоземельного металла. Как правило, в интервале температур от 200 до 420 К соединения RCO_2 демонстрируют переходы второго рода, тогда, как при температурах ниже 200 К – переходы первого рода.

Известно, что при фазовых переходах первого рода в соединениях RCO_2 наблюдается значительный по величине магнитокалорический эффект, который сопровождается магнитным гистерезисом. В настоящее время существует несколько методов измерения МКЭ [2], среди которых прямой метод является наиболее точный. Однако проводить исследования прямым методом имеется возможность не у всех научных групп. Именно поэтому косвенные методы исследования МКЭ, использующие данные по намагниченности и теплоемкости, применяются учеными намного чаще. В случае фазовых переходов первого рода такие данные могут дать большую погрешность при расчетах величины МКЭ. В данной работе проведено корректное сравнительное исследование магнитокалорического эффекта прямым и двумя косвенными методами в области магнитных фазовых переходов первого рода. В качестве основных объектов исследования выбраны многокомпонентные соединения RCO_2 .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-29-00773 <https://rscf.ru/project/22-29-00773/>.

[1] E.Gratz, A.S.Markosyan, J. Physics: Condensed Matte. **13**, R385 (2001).

[2] V.K.Pecharsky, K.A.Gschneidner, Jr., J. Appl. Phys. **86**, 565 (1999).

Применение наноинструментов с эффектом памяти формы для разработки технологии создания бионаносенсоров на основе полупроводниковых нанопроволок

Шавров В.Г.¹, Лега П.В.¹, Коледов В.В.¹, Карцев А.¹, Орлов А.¹, Романов С.¹, Павлов А.¹, Прокунин А.В.¹, фон Гратовски С.В.¹, Do Hung Manh², Ngo Thi Hong Le², Phung Thi Thu², Иржак А.³, Евстафьева М.³

¹ ИРЭ им.В.А.Котельникова РАН, Москва, Россия

e-mail: shavrov@cplire.ru

² Institute of Materials Science, Vietnam Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

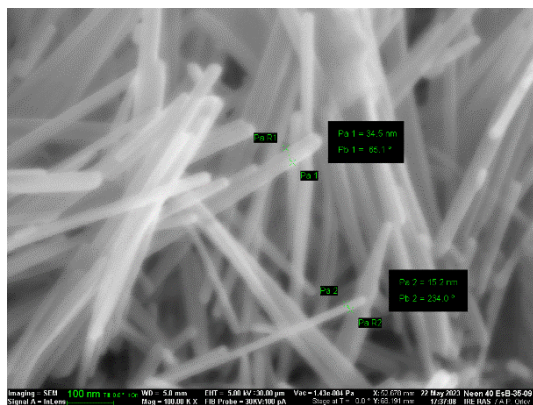
e-mail: hongle@ims.vast.ac.vn

³ Institute of Microelectronics Technology and High-Purity Materials of Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russian Federation

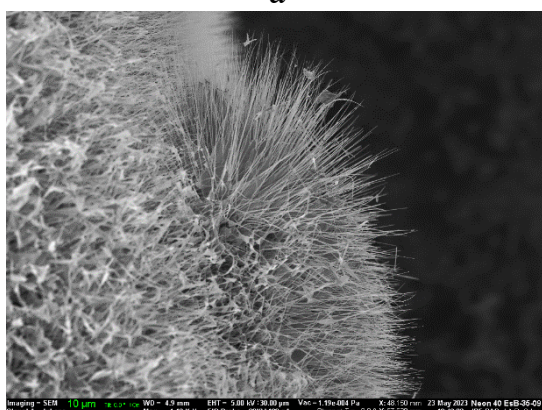
e-mail: airzhak@gmail.com

Одним из основных подходов к разработке высокочувствительных и надежных газовых и биосенсоров на основе нанопроволок (НП) ZnO является создание функционализированных структур полевых транзисторов (ПТ). В качестве активной чувствительной среды в датчиках этого типа используются одиночные или множественные нанопроволоки ZnO. Биомолекулы содержатся в аналитическом растворе и прикрепляются к иммобилизованным ферментам или иммунным агентам на линкерах. Линкеры, в свою очередь, присоединены к преобразователю. Затем преобразователь преобразует заряд анализируемого вещества в электрический сигнал, который затем передается для обработки данных. Одномерные наноструктуры с одиночной нанопроволокой имеют большее отношение поверхности к объему по сравнению с планарными структурами и, следовательно, ожидается, что они будут более чувствительными, чем планарные датчики. Технология механического наноманипулирования все еще остается проблемой для разработки прототипов бионаносенсоров НППТ. Целью настоящей работы является попытка воспользоваться преимуществом технологии механической наноманипулирования «снизу вверх», основанной на применении нанопинцетов с эффектом памяти формы (ЭПФ), для разработки прототипа наносенсора ZnO, а также для изучения процессов манипулирования одиночными нанопроволоками и подготовки НППТ.

НП ZnO были выращены гидротермальным методом в водном растворе [1] (см. рис. 1, а) и парофазным синтезом в горизонтальном проточном реакторе (см. рис. 1 б). НП были охарактеризованы методами XRD, ТЕМ и рамановской спектроскопии. НП ZnO, полученные гидротермальным методом, имеют толщину 15-35 нм и длину 1-2 мкм. НП, полученные методом парофазного синтеза, имеют толщину 30-300 нм и длину до 50 мкм.

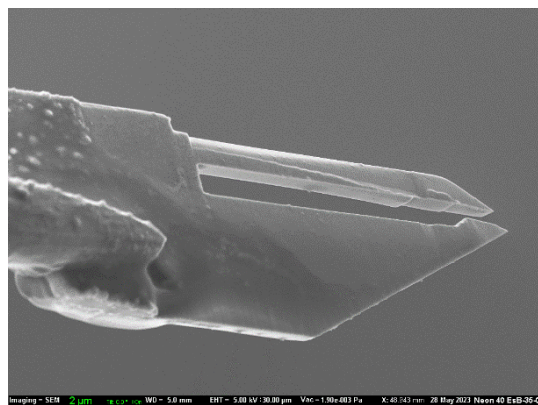


а

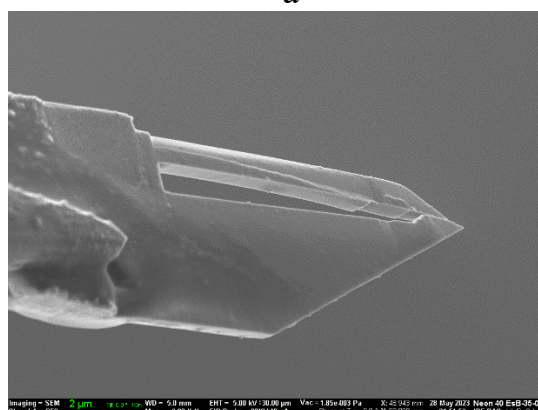


б

Рис. 1. РЭМ-изображения исследуемых нанопроволок ZnO. (а) Нанопроволоки ZnO, полученные гидротермальным методом в водном растворе. (б) Нанопроволоки, полученные методом парафазного синтеза.



а



б

Рис. 2. Наномеханический пинцет с ЭПФ. (а) открытый нанопинцет (холодное, мартенситное состояние сплава с ЭПФ). (б) нанопинцет закрыт (нагрет). (Аустенитное состояние).

Трехмерное манипулирование НП ZnO осуществлялось в вакуумной камере двухлучевой системы SEM/FIB, оснащенной двумя наноманипуляторами Kleiniek. Нанопинцет для экспериментов был разработан на основе аморфно-кристаллических композитов сплава с памятью формы Ti_2NiCu , как описано в [11]. Принцип срабатывания нанопинцетов показан на рис. 2. Приведение в действие нанопинцета достигается тепловым воздействием на вольфрамовый наконечник джоулевым нагревом миниатюрного резистивного элемента. Управляемый изгиб актуатора и обратимое закрытие/открытие зазора нанопинцета достигается за счет термоупругого мартенситного перехода из высокотемпературного аустенитного состояния в низкотемпературное мартенситное состояние. В поликристаллическом сплаве Ti_2NiCu этот переход происходит в интервале температур 46-52 °С при подаче электрического тока 0-5 мА. (см рис. 2) Детали взаимодействия нанопинцета с нанопроволокой показаны на рисунках 3 а-в. Общий протокол наноманипулирования включает шесть основных этапов: (1)

точное линейное позиционирование зазора нанопинцета вблизи объекта. (2) точное угловое позиционирование оси нанопинцета для обеспечения эффективного захвата манипулируемого нанообъекта. (3) закрытие зазора. (4) отделение объекта от окружающей среды. (5) транспортировка до места назначения. (6) освобождение и расположение объекта в пункте назначения.

Основными характерными чертами этих стадий являются:

1) Взаимное линейное позиционирование объекта и наноинструмента должно осуществляться с точностью лучше размера зазора нанопинцета, около 0,5 мкм. В нашем случае это делается с помощью 3D-наноманипуляторов Kliendeik.

2) Взаимное угловое позиционирование нанопинцета и нанообъекта требует особого внимания, т.к. вращающееся автоматическое управление осями наноманипулятора должно осуществляться специальным торсионным приводом. В случае его отсутствия требуется очень тщательная предварительная установка нанопинцета перед экспериментами.

3) Закрытие зазора может сопровождаться тепловым дрейфом нанопинцета, что необходимо учитывать перед выполнением этого этапа.

4) Отрыв нанообъекта от окружающей среды нанопинцетом может быть непредсказуемым. Иногда объекты, которые кажутся легко отделяемыми, оказываются связанными с окружающими объектами, силой, которая может быть сравнима или даже превосходить прочность объекта. Результатом может быть разрушение объекта. Также эта сила может превышать прочность нанопинцетов, что может привести и к его разрушению. Поэтому оценка и контроль четвертого этапа взаимодействия между объектами является важной задачей.

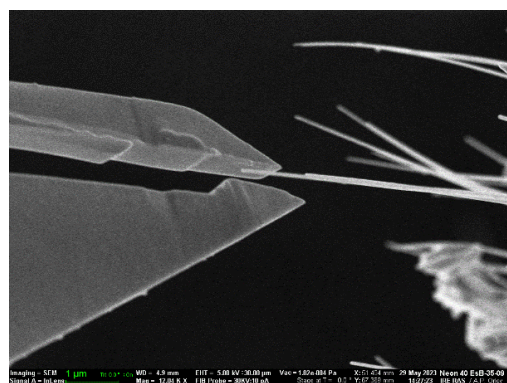
5) Транспортировка может осуществляться как за счет перемещения нанообъекта, так и за счет перемещения подложки назначения.

6) Освобождение нанообъекта и выгрузка нанообъекта может быть легко осуществлена в случае, когда притяжение объекта к нанопинцету меньше четвертой части притяжения к месту назначения. Следует отметить, что это зависит от материалов пинцета, объекта и поверхности назначения,

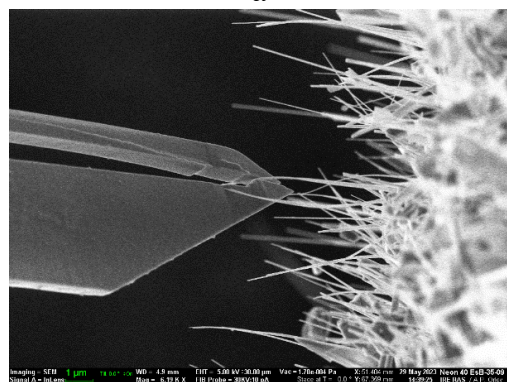
Итак, на рисунке 5 мы видим, что окончательная экспериментальная конструкция ZnO NWFET завершается нанесением платиновых контактов методом FIB-CVD после наноманипулирования.

В заключение можно сказать, что проектирование бионаносенсоров НППТ осуществляется с использованием 3D-наноманипулирования нанопроволоками, как приготовленными гидротермально-жидкостным, так и парогазовым методами. Размер нанопроволок был в пределах 10-300 нм по толщине и 1-50 мкм по длине.

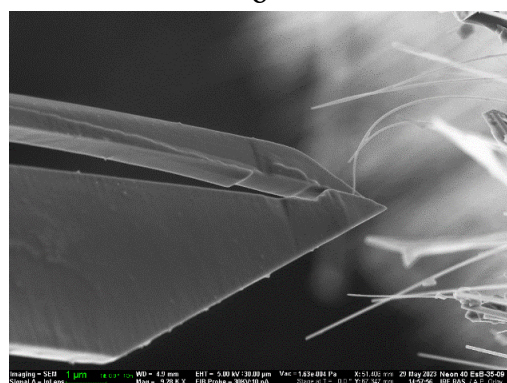
Функциональные наноматериалы были разработаны и изучены при поддержке Министерства науки и технологий Вьетнама, грант NDT. 70e-ASIA/19, Наноманипулирование было выполнено при поддержке РФФ – грант № 22-19-00783.



а

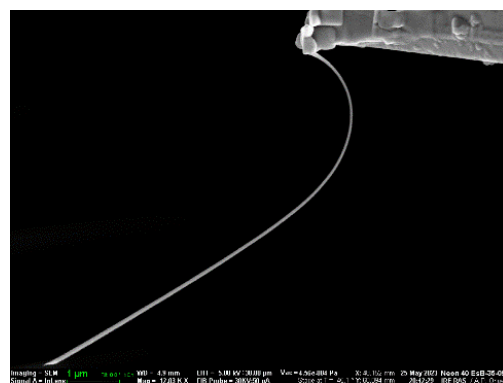


б

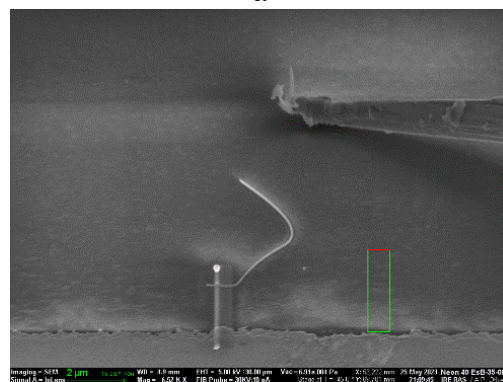


в

Рис. 3. Захват и манипулирование НП нанопинцетом. (а) относительное расположение нанопроволоки и нанопинцета. (б) неудачная попытка нанопроволоку нанопинцетом. (в) успешный захват НП.



а



б



в

Рис. 4. Процесс изготовления НППТ. (а) Выбранная НП. (б) Подключение нанопроволоки к 1-му электроду с помощью FIB-CVD. (в) Подключение НП к электроду ПТ нанесением платиновой пленки с помощью FIB.

- [1] Thu, P. T., Thinh, V. D., Lam, V. D., Bach, T. N., Phong, L. T. H., Tung, D. H., Le, N. T. H. (2022). Decorating of Ag and CuO on ZnO nanowires by plasma electrolyte oxidation method for enhanced photocatalytic efficiency. *Catalysts*, V.12(7), 801.
- [2] Lega, P., Koledov, V., Orlov, A., Kuchin, D., Frolov, A., Shavrov, V., Ari-Gur, P. (2017). Composite Materials Based on Shape-Memory Ti_2NiCu Alloy for Frontier Micro-and Nanomechanical Applications. *Advanced Engineering Materials*, V. 19(8), 1700154.

Магнитосопротивление и переход полупроводник-металл в моносилициде железа

Кудасов Ю.Б., Маслов Д.А.

Саровский физико-технический институт НИЯУ МИФИ, Саров, Россия

Российский федеральный ядерный центр - ВНИИЭФ, Саров, Россия

e-mail: yu_kudasov@mail.ru

В квазичастичном спектре моносилицида железа (FeSi) при низких температурах открывается щель, связанная с сильными электронными корреляциями. При этом внутри щели существует узкая зона с тяжелыми носителями заряда, а на поверхности FeSi возникает топологический двумерный слой с высокой проводимостью. Такая необычная электронная структура приводит к сложному поведению транспортных и магнитных свойств в сильном магнитном поле.

В умеренных полях (до примерно 10 Тл) транспортные свойства при низких температурах определяются перераспределением тока между поверхностными и объемными состояниями. Затем вплоть до 60 Тл магнитосопротивление и холловское сопротивление изменялись незначительно.

В очень сильных магнитных полях должно произойти захлопывание щели за счет зеemanовского расщепления зоны проводимости и валентной зоны. Фазовый переход первого рода полупроводник-металл, сопровождающийся значительным скачком магнитного момента, впервые наблюдался в моно силициде железа при температуре 5 К в магнитном поле 355 Тл в работе [1]. При температуре 77 К происходило плавное изменение проводимости. В целом такая картина соответствовала результатам первопринципных расчетов [2]. Аналогичное поведение наблюдалось также в некоторых Кондо-изоляторах.

Однако результаты исследования магнитосопротивления, проведенного недавно [3], показали наличие плавного перехода при значительно более низком магнитном поле (до 270 Тл).

В работе проведен тщательный анализ индукционной и высокочастотной методик измерения проводимости и намагниченности. Показано, что обнаруженные противоречия в оценке критического магнитного поля перехода в FeSi в действительности отсутствуют: наблюдаемые расхождения связаны с существенным различием в динамических диапазонах методик, использованных в работах [1] и [3]. Более того, измерения дополняют друг друга и позволяют построить полную физическую картину эволюции электронной структуры FeSi в широком диапазоне магнитных полей.

Работа выполнена при поддержке Национального центра физики и математики (направление №7 «Исследований в сильных и сверхсильных магнитных полях»).

- [1] Кудасов Ю Б и др. Письма в ЖЭТФ **68**, 326 (1998); Кудасов Ю Б и др. ЖЭТФ **116**, 1770 (1999).
- [2] Anisimov V I et.al. Phys.Rev.Lett. **76**, 1735 (1996).
- [3] Nakamura D. et.al. Phys.Rev.Lett. **127**, 156601 (2021).

Кулоновские корреляции в двумерных полупроводниках

Глазов М.М.

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

e-mail: glazov@coherent.ioffe.ru

Двумерные полупроводниковые кристаллы на основе дихалькогенидов переходных металлов, например, монослои MoS_2 и WSe_2 являются новыми экстремально-двумерными полупроводниками, где очень ярко проявляются межчастичные эффекты. Это связано значительным кулоновским взаимодействием в таких системах. Например, энергии связи экситонов – электрон-дырочных пар и трионов – трехчастичных комплексов, состоящих из двух электронов и дырки или двух дырок и электрона, достигают, соответственно, нескольких сотен и нескольких десятков мэВ. Такие кулоновские комплексы стабильны вплоть до комнатной температуры и определяют многие оптические, транспортные и спиновые эффекты в двумерных полупроводниках, см. работы [1,2,3] в качестве обзоров.

В докладе представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований проявлений кулоновских эффектов в моно- и бислоях дихалькогенидов переходных металлов. План доклада:

- 1) Экситоны и трионы в атомарно-тонких кристаллах [1,2].
- 2) Экситоны, взаимодействующие с морем носителей заряда: тетроны Суриса/ферми-поляроны [4,5].
- 3) Транспортные эффекты в смесях бозе- и ферми-частиц [6].
- 4) Вигнеровский кристалл и другие многочастичные фазы в двумерных полупроводниках [7].

Работа поддержана грантом РФФИ 23-12-00142.

- [1] М.В. Дурнев, М.М. Глазов, УФН **188**, 913 (2018).
[2] G. Wang, A. Chernikov, M. M. Glazov, et al., Rev. Mod. Phys. **90**, 021001 (2018).
[3] М.М. Глазов, Е.Л. Ивченко, Письма в ЖЭТФ **113**, 10 (2021).
[4] М.М. Glazov, J. Chem. Phys. **153**, 034703 (2020).
[5] K. Wagner, E. Wietek, J. D. Ziegler, M. A. Semina, et al., Phys. Rev. Lett. **125**, 267401 (2020).
[6] K. Wagner, Z. A. Iakovlev, J. D. Ziegler, et al., Nano Letters 10.1021/acs.nanolett.2c03796 (2023).
[7] T. Smoleński, et al., Nature **595**, 53 (2021).

Спин-орбитальное взаимодействие и эффект Яна-Теллера: друзья или враги?

Стрельцов С.В.¹, Темников Ф.В.¹, Хомский Д.И.², Кугель К.И.³

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

² II. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Köln, Germany

³ Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, Москва
e-mail: klimkugel@gmail.com

В последние годы громадный интерес вызывают эффекты, связанные со спин-орбитальным взаимодействием в различных материалах. Это и топологические изоляторы и полуметаллы, и “китаевские материалы”, и спин-орбитальные моттовские изоляторы, и соединения, которые потенциально могут быть использованы в антиферромагнитной спинтронике, и т.д. Важно отметить, что несмотря на пристальное внимание к спин-орбитальному взаимодействию его влияние на такое фундаментальное явление, как эффект Яна-Теллера, глубоко не исследовалось. Вероятно, это связано с тем, что многие результаты в этом направлении были получены на заре “ян-теллеровской науки”. Были частично исследованы пределы LS - и jj -связи, однако аккуратно изучить поведения ян-теллеровских систем при произвольной силе спин-орбитального взаимодействия в тот момент было затруднительно.

Развитие численных методов позволило решить данную проблему. Нами была выполнена точная диагонализация многоэлектронного гамильтониана, содержащего кулоновское, вибронное и спин-орбитальное взаимодействия в случае t_{2g} электронных орбиталей и E и T фононов для всех возможных целочисленных электронных заполнений. Была обнаружена нетривиальная связь между спин-орбитальным взаимодействием, хундовским внутриатомным обменом и эффектом Яна-Теллера, которая приводит к ряду экспериментально наблюдаемых эффектов. Например, было показано, что в случае одного d -электрона спин-орбитальное взаимодействие подавляет ян-теллеровские искажения, приводя к топологии энергетической поверхности адиабатического потенциала типа “мексиканская шляпа”, что подразумевает существование голдстоуновской моды и может потенциально использоваться для квантовых вычислений. Наоборот, классически конфигурация t_{2g}^3 рассматривалась как ян-теллеровски неактивная, существенное спин-орбитальное взаимодействие индуцирует появление ян-теллеровских искажений даже в этой ситуации [1, 2].

[1] S.V.Streltsov, D.I.Khomskii, Phys. Rev. X **10**, 031043 (2020).

[2] S.V.Streltsov, F.V.Temnikov, K.I.Kugel, D.I.Khomskii, Phys. Rev. B **105**, 205142 (2022).

Фазовый переход «жидкость-жидкость» в воде

Мокшин А.В., Власов Р.В.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

e-mail: anatolii.mokshin@mail.ru

Для кристаллических твердых тел характерен полиморфизм: возможна реализация равновесных фаз с различной структурой. В отличие от этого, в жидкостях, как равновесных и переохлажденных, полиморфизм проявляется через определяемые на фазовой диаграмме термодинамические области, на которых ближний и средний порядок (локальная структура) являются разными. Граница перехода между этими областями на фазовой диаграмме определяется характером межмолекулярного взаимодействия и величиной давления, а соответствующие этим областям фазы обозначаются как фазы низкой и высокой плотностей. В случае воды данный переход соответствует давлениям порядка $10^8 \div 10^9$ Па. В окрестности перехода динамика молекул воды меняется существенным образом, что, в частности, отображается в достижении коэффициентом самодиффузии максимальных значений. Кроме того, изменения структуры также проявляются в изменениях в кинетике формирования водородных связей, что фиксируется в значениях таких величин как среднее время водородной связи, средние времена различных координированностей, а также частоты изменения различных координированностей. Предложена интерпретация кинетики водородных связей в рамках концепции ландшафта свободной энергии в пространстве возможных координированностей.

Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 19-12-00022, <https://rscf.ru/project/19-12-00022/>)

Секция А1

Моделирование фазовых
переходов и критических
явлений

Искусственные нейронные сети как инструмент для прогнозирования температуры аррениусовского перехода аморфообразующих жидкостей

Галимзянов Б.Н., Доронина М.А., Мокшин А.В.
Казанский федеральный университет, Казань, Россия
e-mail: bulatgnmail@gmail.com

Температура аррениусовского перехода T_A соответствует термодинамическому состоянию, в котором атомистическая динамика жидкости становится гетерогенной и кооперативной, в то время как активационный барьер диффузионной динамики становится зависимым от температуры T при $T < T_A$ [1]. Теоретическая оценка этой температуры затруднительна для некоторых типов материалов, особенно для силикатов и боратов. В этих материалах температурная зависимость самодиффузии воспроизводится законом Аррениуса, где активационный барьер практически не зависит от T .

Цель исследования настоящей работы заключается в установлении соответствия между температурой T_A и физическими свойствами жидкостей, непосредственно связанными с их аморфообразующей способностью. С помощью модели машинного обучения была рассчитана температура T_A для силикатов, боратов, органических соединений и расплавов металлов различного состава [2]. В качестве входных параметров использовались эмпирические значения температуры стеклования T_g , температуры плавления T_m , отношения этих температур T_g/T_m и индекса хрупкости m . Установлено, что температуры T_g и T_m являются значимыми параметрами, тогда как их отношение T_g/T_m и индекс хрупкости m мало коррелируют с температурой T_A .

Важным результатом настоящей работы является аналитическое уравнение следующего вида

$$T_A(T_g, T_m) = a_1 T_g + a_2 T_g^2 + b_1 T_m + c_1 T_g T_m,$$

связывающее температуры T_g , T_m и T_A , которое с алгебраической точки зрения является уравнением для искривленной поверхности второго порядка (значения коэффициентов a_1 , a_2 , b_1 и c_1 определяются через нелинейный регрессионный анализ). Показано, что это уравнение позволяет корректно оценивать температуру T_A для большого класса материалов, независимо от их состава и стеклообразующей способности.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 19-12-00022).

[1] P.G. Debenedetti, F.H. Stillinger, Nature **410**, 259 (2001).

[2] B.N. Galimzyanov, M.A. Doronina, A.V. Mokshin, Materials **16**, 1127 (2023).

Моделирование переходных процессов в сверхпроводнике при критических режимах работы магнитной муфты

Мартиросян И.В., Покровский С.В., Абин Д.А., Осипов М.А.,
Стариковский А.С., Веселова С.В., Михайлова И.К., Руднев И.А.
Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ», Москва, Россия
e-mail: mephizic@gmail.com

Одним из перспективных направлений в области прикладной сверхпроводимости в настоящее время является разработка и оптимизация кинетических накопителей энергии на основе высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП). Магнитная муфта является одним из ключевых элементов конструкции накопителя, позволяющим выполнять подвод и снятие энергии, накопленной маховиком. При этом от количества энергии, которую необходимо подвести или же снять зависит и требуемая скорость вращения муфты. Сверхпроводящие магнитные муфты обладают рядом преимуществ перед традиционными аналогами на основе постоянных магнитов: высокая сила и жесткость сцепки, хорошая стабилизация. Однако при высоких скоростях вращения в таком устройстве могут наблюдаться эффекты перераспределения магнитного потока, локальный нагрев, формирование горячих пятен, что в конечном итоге может привести к переходу сверхпроводника в нормальное состояние с последующим выделением энергии в виде активных потерь.

В настоящей работе представлены результаты мультифизического моделирования процессов формирования и распространения нормальной зоны в высокотемпературных сверхпроводящих лентах второго поколения, являющихся основным конструкционным элементом магнитной муфты сверхпроводящего накопителя энергии. В рамках работы рассмотрены различные конфигурации магнитной муфты. В частности, проведено сравнение активных потерь, возникающих в критических режимах работы магнитной муфты на основе стопок композитных ВТСП лент, а также магнитной муфты на основе сверхпроводящих колец. Моделирование выполнено в широком интервале температур (от 20 до 80 К) для различных скоростей вращения роторных элементов муфты. Помимо этого, рассматриваются три конфигурации магнитных сборок муфты: сборка со встречно-ориентированными постоянными магнитами, сборка со сонаправленными магнитами, а также магнитная сборка Халбаха. Получены зависимости потерь от частоты вращения муфты, показана динамика тепловых процессов в системе. С практической точки зрения выявленные тенденции обуславливают различную перспективность применения магнитных сборок, стопок ВТСП лент и сверхпроводящих колец для сверхпроводящих накопителей энергии различной мощности.

Расчет выполнен методом конечных элементов с использованием комбинированной А-Т-Н – формулировки [1]. Суть комбинированной формулировки заключается в разбиении геометрии системы для отдельного анализа объемных ВТСП доменов в терминах компонент магнитного поля \mathbf{H} и расчете плоских ВТСП доменов в А-Т формализме. При решении задач в А-Т формулировке решатель использует две переменные состояния: токовый векторный потенциал \mathbf{T} (ТВП) и магнитный векторный потенциал \mathbf{A} (МВП). ТВП применяется к сверхпроводящим областям для решения задачи о распределении плотности тока \mathbf{J} в сверхпроводнике:

$$\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{T} = \nabla \times (T\mathbf{n}) \quad (1)$$

, где \mathbf{n} – вектор нормали.

Управляющее уравнение системы (СП-домены) представляет собой закон Фарадея:

$$\nabla \times \mathbf{E} = \nabla \times \left(E_0 \left(\frac{|\mathbf{J}|}{J_c(B,T)} \right)^n \frac{\mathbf{J}}{J_c(B,T)} \right) = \nabla \times \left(E_0 \left(\frac{|\nabla \times \mathbf{T}|}{J_c(B,T)} \right)^n \frac{\nabla \times \mathbf{T}}{J_c(B,T)} \right) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2)$$

, где \mathbf{E} – напряженность электрического поля, E_0 – критерий, равный 1 мкВ/см, \mathbf{B} – индукция магнитного поля, J_c – критический ток сверхпроводника, получаемый на основе транспортных измерений ВТСП лент.

Расчет производится с учетом температурных зависимостей теплоемкостей, плотностей и теплопроводностей всех слоев ВТСП композита [2-5], который определяется как объемный источник тепла. При реализации охлаждения жидким азотом производится учет гистерезисного характера кривой кипения хладагента.

Работа выполнена в рамках Госзадания (проект FSWU-2022-0013) при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ

- [1] M. Osipov, Supercon. Scie. and Tech. 34, 4, 045003, (2021).
- [2] R. Wesche, HTS for Fusion Conductor Workshop, May 26-27 (2011).
- [3] S. H. Jang et al., IEEE Trans. on App. Supercon., 13, 22956-2959,(2003).
- [4] M. Zeisberger, Supercon. Scie. and Tech., 18, 2, S202, (2005).
- [5] J. Lu, E. Jour. App.d Phys., vol. 103, no. 6, p. 064908, (2008).

Молекулярная динамика процесса кристаллизации и роста газовых гидратов

Хуснутдинов Р.М., Хайруллина Р.Р., Юнусов М.Б.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
e-mail: khrm@mail.ru

Выяснение механизмов структурообразования в молекулярных комплексах по типу «хозяин-гость» представляет одну из важнейших задач физики конденсированного состояния. Примерами таких систем являются природные гидраты – газогидраты [1-4]. Они образованы из молекул газа (молекулы-гости), которые заключены в полости трехмерных решеток из молекул воды – водные клатратные каркасы (каркасы хозяина) [5]. Природные гидраты являются одной из форм существования газа в недрах Земли и считаются перспективными источниками углеводородного газа [6].

В данной работе моделированием молекулярной динамики мы изучаем процессы зародышеобразования и роста гидрата метана в сильно переохлажденной двухфазной системе «метан-вода», полученной при различных протоколах охлаждения. Моделирование процесса кристаллизации и роста гидрата метана в сильно переохлажденной двухфазной системе «метан-вода» выполнялось в программном комплексе LAMMPS [7]. Начальная конфигурация системы представляла собой 64 ($4 \times 4 \times 4$) элементарные ячейки sI-гидрата метана, состоящая из 2944 молекул воды и 512 молекул метана. Взаимодействие между молекулами осуществлялось с помощью крупнозернистой модели потенциала межчастичного взаимодействия, которая по сравнению со всеатомными моделями обладает более высокой вычислительной эффективностью [8]. Моделирование выполнялось в NpT-ансамбле с использованием термостата и баростата Нозе-Гувера с параметрами релаксации $\tau_T=0.1$ и $\tau_p=1.0$ пс. Интегрирование уравнений движений молекул осуществлялось с помощью алгоритма Верле в скоростной форме с временным шагом 10.0 фс [9]. Периодические граничные условия были наложены во всех трех направлениях.

На первом этапе моделирования производилось плавление кристаллической решетки гидрата метана при температуре $T=425$ К и давлении $p=500$ атм до полного исчезновения исходной кристаллической структуры и образования двухфазной жидкой системы «метан-вода». На втором этапе, выполнено охлаждение полученной системы до температуры $T=210$ К. Охлаждение системы осуществлялось со скоростями $\gamma=1.0$ и 10.0 К/пс. На следующем этапе, наблюдался процесс затвердевания данной системы и образования гидрата метана в течение 50 нс. Для статистической обработки результатов моделирования при каждой скорости охлаждения выполнено по 30 независимых численных экспериментов.

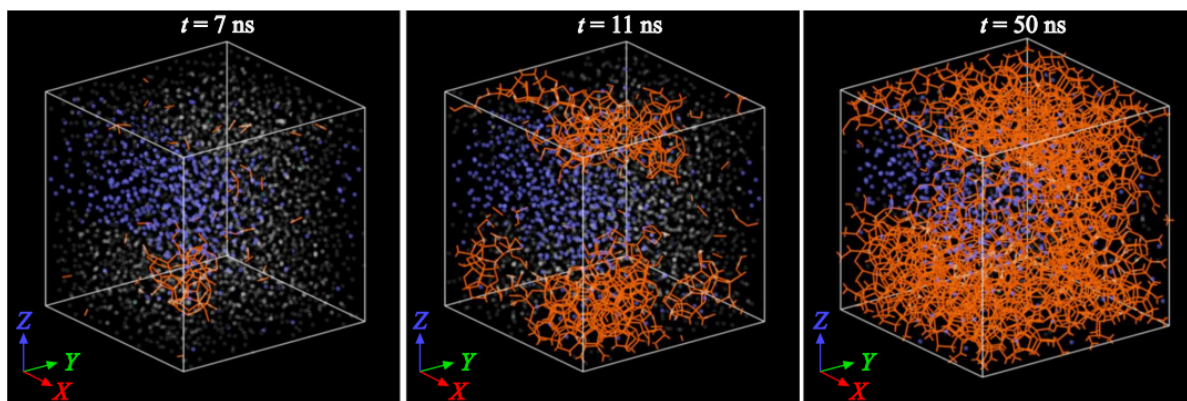


Рис. 1. Зародышеобразование и рост гидрата метана из переохлажденной двухфазной жидкости «метан-вода» при $T=210$ К и $p=500$ атм. Скорость охлаждения системы $\gamma=10.0$ К/пс. Фаза гидрата была идентифицирована при помощи алгоритма CHILL+, соответствующие водородные связи обозначены оранжевым цветом. Синие шары представляют молекулы метана, белые шары – молекулы воды, не находящиеся в фазе гидрата.

Для идентификации клатратных структур был использован метод кластерного анализа CHILL+, основанный на расчете корреляционной функции локальных параметров ориентационного порядка [10]. На рис. 1 представлены результаты кластерного анализа для сильно-переохлажденной двухфазной системы «метан-вода» при температуре $T=210$ К и давлении $p=500$ атм, полученный быстрым охлаждением системы со скоростью $\gamma=10.0$ К/пс. Фаза гидрата была идентифицирована при помощи алгоритма CHILL+, соответствующие водородные связи обозначены оранжевым цветом. Из рисунка видно, что при достаточно глубоком переохлаждении в системе образуются кристаллические формы гидрата метана. При этом, процесс зародышеобразования и роста гидрата начинается уже на ранних этапах (порядка нескольких наносекунд). Количественно процесс нуклеации и роста гидрата метана с различными скоростями охлаждения ($\gamma=1.0$ и 10.0 К/пс) для тридцати независимых молекулярно-динамических итераций изображен в виде набора траекторий роста на рис. 2. Из рисунка видно, что при скорости охлаждения $\gamma=1.0$ К/пс во всех независимых молекулярно-динамических итерациях наблюдался процесс зародышеобразования и роста газового гидрата, в то время как при скорости охлаждения $\gamma=10.0$ К/пс в восьми из тридцати ($\approx 26.7\%$) численных экспериментов нуклеационное событие не наблюдалось. Дальнейшая оценка значений нуклеационных характеристик осуществлялась посредством статистической обработки траекторий роста самого крупного кристаллического зародыша по результатам независимых молекулярно-динамических расчетов – в рамках метода среднего времени первого появления (СВПП) [11].

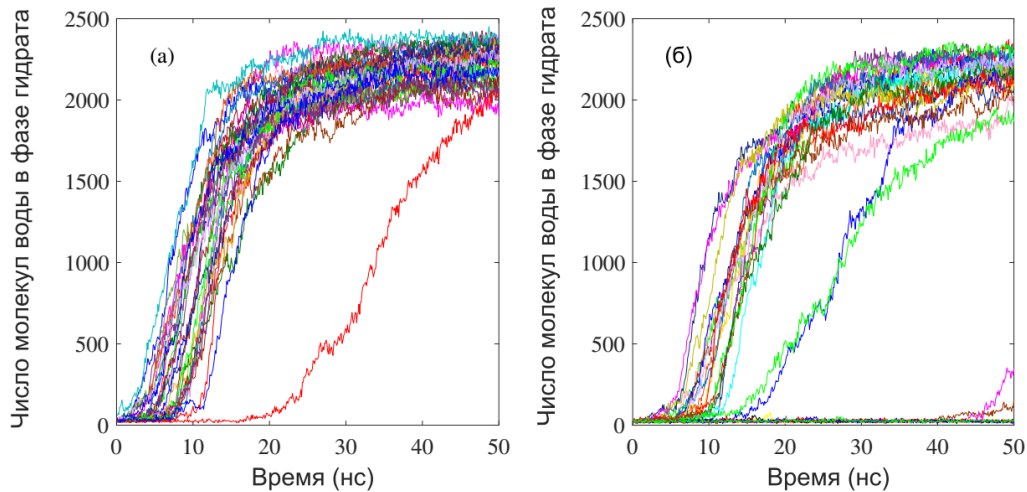


Рис. 2. Зависимости числа молекул воды, образующих структуру гидрата, от времени моделирования при различных скоростях охлаждения: (а) $\gamma=1.0$ К/пс и (б) $\gamma=10.0$ К/пс.

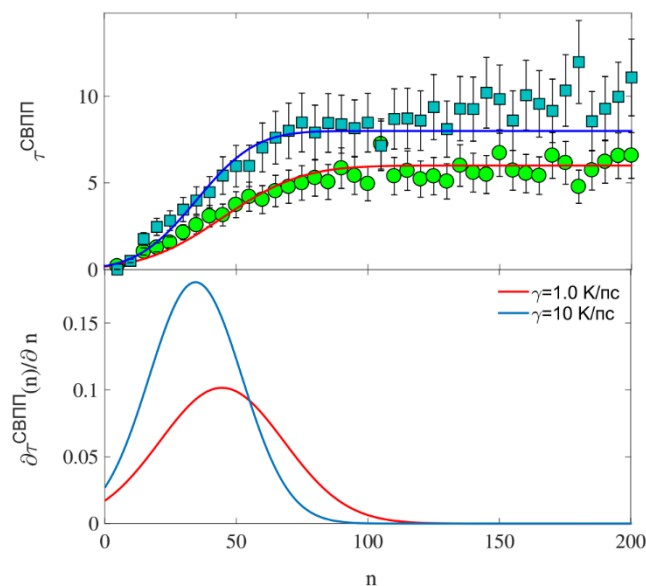


Рис. 3. Графики СВПП-кривой (верхняя колонка) и её первой производной (нижняя колонка), рассчитанные при двух скоростях охлаждения системы: $\gamma=1.0$ К/пс (кружочки) и $\gamma=10.0$ К/пс (квадраты).

На рис. 3 представлены СВПП-кривые, полученные из усредненных инвертированных кривых $n(t)$ при двух различных скоростях охлаждения $\gamma=1.0$ и $\gamma=10.0$ К/пс: маркеры обозначают результаты моделирования молекулярной динамики; сплошные линии – результаты подгонки. Из рисунка видно, что с увеличением скорости охлаждения системы наблюдается увеличение среднего временного масштаба нуклеации τ_c и уменьшение критического размера зародыша n_c (см. нижнюю колонку).

Таким образом, в настоящей работе представлены результаты молекулярно-динамического моделирования процесса гидратообразования в сильнопереохлажденной двухфазной системе «метан-вода». Результаты моделирования демонстрируют, что при достаточно высоких скоростях охлаждения в системе всё еще могут образовываться кристаллические формы гидрата метана. Показано, что на начальном этапе фазового перехода реализуется сценарий гомогенного кристаллического зародышеобразования. Установлено, что с увеличением скорости охлаждения системы наблюдается увеличение среднего временного масштаба нуклеации τ_c и уменьшение критического размера зародыша n_c .

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-22-00508). Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского (Приволжского) федерального университета.

- [1] V.K. Michalis, J. Costandy, I.N. Tsimpanogiannis, A.K. Stubos, I.G. Economou, *J. Chem. Phys.* **142**, 044501 (2015).
- [2] N.N. Nguyen, M. Galib, A.V. Nguyen, *Energy Fuels* **34**, 6751 (2020).
- [3] М.Б. Юнусов, Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин, *ФТТ* **63**, 308 (2021).
- [4] M.B. Yunusov, R.M. Khusnutdinoff. *J. Phys. Conf. Ser.* **2270**, 012052 (2022).
- [5] М.Б. Юнусов, Р.М. Хуснутдинов. *Учен. зап. физ. фак-та Моск. ун-та* **4**, 2240702 (2022).
- [6] O. Gaidukova, S. Misyura, P. Strizhak, *Energies* **15**, 1799 (2022).
- [7] L.C. Jacobson, V. Molinero, *J. Phys. Chem. B* **114**, 7302 (2010).
- [8] S. Plimpton, *J. Comput. Phys.* **117**, 1 (1995).
- [9] L. Verlet, *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967).
- [10] A.H. Nguyen, V. Molinero, *J. Phys. Chem. B* **119**, 9369 (2015).
- [11] A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 11340 (2017).

Компьютерное моделирование фазовых переходов в тонких пленках с решеткой антидотов

Белим С.В., Симакова С.С., Тихомиров И.В.

Омский государственный технический университет, Омск, Россия

e-mail: sbelim@mail.ru

Ферромагнитные антидотные структуры представляют собой непрерывную пленку с периодической матрицей отверстий [1,2]. Такой подход изменяет магнитные свойства материалов. Тонкопленочные материалы с управляемыми параметрами имеют важное значение при создании устройств спинтроники. Магнитные антидоты являются перспективными материалами для создания магнитных транзисторов нового поколения [3-5].

В работе рассматриваются ферромагнитные пленки толщиной D моноатомных слоев. Решетка антидотов реализована как поры квадратной формы. Поры расположены в узлах квадратной решетки с периодом d . Сторона квадрата поры равна $a=d/2$.

Для описания магнитных свойств системы используется модель Изинга, гамильтониан которой имеет вид:

$$H = -J \sum_{(i,j)} s_i s_j + h \sum_i s_i .$$

Для моделирования фазовых переходов использован кластерный алгоритм Вольфа и теория конечно-размерного скейлинга. В результате компьютерного эксперимента показано, что температура Кюри системы растет с увеличением периода решетки по логарифмическому закону.

$$T_C = 2.384 + 0.347 \cdot \ln d$$

Критические индексы тонкой пленки с решеткой антидотов совпадают со значениями для двумерной модели Изинга.

Перемагничивание системы моделировалось с помощью алгоритма Метрополиса. Были построены петли гистерезиса для систем с различным периодом решетки антидотов d . Показано, что коэрцитивная сила растет нелинейно с увеличением периода решетки антидотов. Значение коэрцитивной силы стремится к предельному значению для сплошной тонкой пленки при росте периода решетки антидотов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 23-29-00108.

- [1] O. N. Martyanov et al., Phys. Rev. B **75**, 174429 (2007).
- [2] M. Vázquez et al., J. Magn. Magn. Mater. **320**, 1978 (2008).
- [3] L.S. Moore, D. Goldhaber-Gordon Nature Phys. **3**, 295 (2007).
- [4] V. Berouille et al., Sensors Actuators A **103**, 23 (2003)
- [5] K. Seeman, H. Leiste, C. Ziebert, J. Magn. Magn. Mater. **316**, e879 (2007)

Исследования антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими взаимодействиями и магнитным полем

Муртазаев К.Ш., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К.

¹Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: 5kurban@mail.ru

Системы с конкурирующими обменными взаимодействиями находят большой интерес в области физики конденсированного состояния. Наличие в системе конкурирующих взаимодействий кардинально меняет магнитные и термодинамические свойства аналогичной системы без конкурирующих взаимодействий [1].

Гамильтониан исследуемой модели записывается в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - J_2 \sum_{\langle\langle i,l \rangle\rangle} S_i \cdot S_l - h \sum_i S_i$$

где $S_{i,j,l} = \pm 1$ – изинговский спин, J_1 и J_2 – константы обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, h – величина магнитного поля (приводится в единицах $|J_1|$).

Репличным алгоритмом метода Монте-Карло исследована антиферромагнитная модель Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей для разных значений магнитных полей. Построены температурные и полевые зависимости основных термодинамических параметров. Получены магнитные структуры в низкотемпературной области. Определён род фазового перехода для разных значений магнитных полей [2].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 20-32-90079 – аспиранты. Также работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС»

[1] S.S. Sosin, L.A. Prozorova, A.I. Smirnov, Phys. Usp. **175**, 83–90 (2005).

[2] K. Sh.Murtazaev, M.A.,Magomedov, A.K.Murtazaev, M.K.Ramazanov, Physica E **148**, 115646 (2023).

Теория спиновой переориентации в редкоземельных ортоферритах и ортохромитах

Москвин А.С., Васинович Е.В.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

e-mail: alexander.moskvin@urfu.ru

Несмотря на почти 60-летнюю историю исследований спиновой переориентации в редкоземельных ортоферритах и ортохромитах [1] многие принципиальные вопросы теории этого уникального явления остаются дискуссионными. Мы представляем краткий обзор основных 4f-3d-взаимодействий – магнитодипольного, симметричного и антисимметричного обменных взаимодействий, их зависимости от структуры и типа редкоземельного иона, вклада в анизотропию, намагниченность и эффект температурной компенсации магнитного момента. Показан аномальный характер 4f-3d-обмена в перовскитах с R=Sm. Дан обзор основных механизмов магнитной анизотропии 3d-подрешетки, показана нерегулярная зависимость констант анизотропии от номера R-иона [2]. Для учета вклада R-подрешетки в свободную энергию при низких температурах мы предлагаем "одnodублетную" модель, рассматривающую хорошо изолированные нижние крамерсов дублет или некрамерсов квазидублет 4f-ионов. В рамках модели развита простая, но реалистичная микроскопическая теория спонтанной спиновой переориентации в редкоземельных ортоферритах RFeO₃ и ортохромитах RCrO₃, индуцированной 4f-3d-взаимодействием [3]. Показано, что и температура, и характер спин-переориентационного перехода являются результатом конкуренции спиновой анизотропии второго и четвертого порядков 3d-подрешетки, кристаллического поля для 4f-ионов и 4f-3d-взаимодействия.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-22-00682.

- [1] К.П.Белов, А.К.Звездин, А.М.Кадомцева, Р.З.Левитин, Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках, Наука, Москва (1979).
- [2] A.S.Moskvin, Magnetochemistry **7**, 111 (2021).
- [3] A.S.Moskvin, E.V.Vasinovich, A.V.Shadrin, Magnetochemistry **8**, 45 (2022).

Первопринципные расчеты обменных интегралов переходных металлов и структур на их основе

Мамонова М.В., Макеев М.Ю., Прудников В.В.

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

e-mail: mamonovamv@omsu.ru

Целью данного исследования является расчет постоянной кристаллической структуры, магнитных моментов атомов и интегралов обменного взаимодействия для ближайших и следующих за ближайшими соседями для объемных ферромагнетиков Ni, Co, Fe и их бинарных соединений. Возможность теоретического определения обменных характеристик позволит предсказать лучшую комбинацию материалов для применения в мультислойных магнитных структурах с эффектами гигантского магнитосопротивления[1].

В основе первопринципных расчетов электронной и кристаллической структуры магнитных материалов лежит спиновая теория функционала плотности и численное решение системы уравнений Кона-Шэма. Для осуществления первопринципных расчетов постоянной кристаллической структуры в данной работе применялся лицензионный программный пакет VASP[2] с использованием набора псевдопотенциалов и метода проекционно-присоединенных волн.

Для вычисления константы межатомного обменного взаимодействия воспользуемся программным пакетом SPRKKR (Spin-polarized Relativistic Korringa-Kohn-Rostoker band program) [3], который позволяет выполнять неэмпирические расчеты электронной структуры трехмерных периодически упорядоченных систем в рамках метода Корринги-Кона-Ростокера в приближении когерентного потенциала. Метод Корринги-Кона-Ростокера (ККР) имеет ряд полезных особенностей, делающих его привлекательным для применений в физике твердого тела. Вследствие интегрирования комплексной энергии, метод ККР является весьма эффективным в вычислительном плане и позволяет решать задачи, связанные с примесями в кристалле без использования дополнительной геометрии, связанной с формированием суперячейки.

Из условия минимума полной энергии мы получили оптимизированную постоянную решетки для объемных ферромагнетиков Ni, Co, Fe и их бинарных соединений, используя различные приближения обменно-корреляционного потенциала, как локальной плотности (VWN), так и обобщенного градиента (PBE). Сравнение рассчитанных значений приведенных в таблице 1. с результатами эксперимента, показывают, что мы должны использовать приближение PBE для описания этих металлов.

Исследовался случай коллинеарного магнетизма спины атомов ориентированы в одном направлении. Рассчитанные значения магнитных

моментов μ атома приведены в таблице 1. В соответствии с представлением о магнитных свойствах атомов наибольшим магнитным моментом обладает атом Fe, а наименьшим атом Ni.

Таблица 1 Значения постоянной решетки и магнитных моментов атома

		a, Å	μ_{spin} μ_B	μ_{orb} μ_B
Co ГЦК	ККР PBE	3,55	1,588	0,071
	ККР VWN	3,45	1,493	0,061
	VASP PBE	3,517	1,583	0,071
	EXP [4]	3,544		
Co ПК	ККР PBE	2,32	1,969	0,090
	ККР VWN	2,24	1,615	0,077
	ККР VBH	2,24	1,548	0,076
Fe ОЦК	ККР PBE	2,88	2,449	0,053
	ККР VWN	2,79	2,170	0,046
	VASP PBE	2,833	2,237	0,051
	EXP [4]	2,866	2,27	0,12
Fe ПК	ККР PBE	2,35	2,553	0,055
	ККР VWN	2,27	2,193	0,042
	ККР VBH	2,21	0,001	0,000
Ni ГЦК	ККР PBE	3,55	0,607	0,051
	ККР VWN	3,60	0,605	0,054
	VASP PBE	3,513	0,599	0,050
	EXP [4]	3,524	0,656	0,055
Ni ПК	ККР PBE	3,86	0,000	0,000
	ККР VWN	3,75	0,000	0,000
Co_xNi_{1-x} ГЦК	x=0,75	3,514	1,6644	0,0799
	x=0,5	3,516	1,6906	0,0806
	x=0,25	3,510	1,7267	0,1016
Fe_xNi_{1-x} ГЦК	x=0,75	3,469	2,1134	0,04997
	x=0,5	3,432	2,3535	0,03959
	x=0,25	3,462	2,8749	0,05364

В таблице 2 показаны результаты расчетов обменных интегралов для Co, Fe, Ni в различных приближениях обменно-корреляционного потенциала в зависимости от типа кристаллической решетки. Как видно для всех металлов обменное взаимодействие носит ферромагнитный характер. Полученные результаты обменных интегралов близки к расчетам других

авторов. Наибольшим обменным взаимодействием обладает кобальт с простой кубической решеткой. По рассчитанным значениям обменного интеграла в рамках молекулярного поля была оценена температура Кюри.

Таблица 2 Рассчитанные значения обменных интегралов и температуры Кюри

Металл	Приближение	J_1 , эВ	J_1 10^{-14} эрг	T_c , К
Co ГЦК	PBE	0,013	2,2	1519,9
	[5]		2,365	
Co ПК	PBE	0,038	6,1	2074,6
Fe ОЦК	PBE	0,018	2,9	1247,3
	VWN	0,019	3,1	1088,6
	[5]		3,121	
Fe ПК	PBE	0,010	1,7	153,1
	VWN	0,011	1,8	164,9
Ni ГЦК	PBE	0,003	0,4	355,8
	VWN	0,002	0,4	323,4
	[5]		0,449	

Таблица 3 Рассчитанные значения обменных интегралов бинарных соединений

J_{ij} , 10^{-14} эрг	Co	$Co_{0,75}Ni_{0,25}$	$Co_{0,5}Ni_{0,5}$	$Co_{0,25}Ni_{0,75}$	Ni
J_1^{Co-Ni}		0,843	1,211	1,338	
J_1^{Co-Co}	2,047	2,885	3,411		
J_1^{Ni-Ni}			0,471	0,419	0,179
$J_1^{средн}$	2,047	1,864	1,363	0,878	0,179
J_2^{Co-Co}	0,127	0,015	-0,026	-0,058	
J_2^{Ni-Ni}		-0,037	-0,069	-0,056	-0,004
$J_2^{средн}$	0,127	0,002	-0,047	-0,057	-0,004
J_{ij} , 10^{-14} эрг	Fe	$Fe_{0,75}Ni_{0,25}$	$Fe_{0,5}Ni_{0,5}$	$Fe_{0,25}Ni_{0,75}$	Ni
J_1^{Fe-Ni}		1,119	1,134	1,821	
J_1^{Fe-Fe}	2,674	-0,150	2,345		
J_1^{Ni-Ni}			0,471	0,282	0,179
$J_1^{средн}$	2,674	0,485	1,175	1,051	0,179
J_2^{Fe-Fe}	1,493	0,685	1,042	0,688	
J_2^{Ni-Ni}		-0,001	-0,038	-0,054	-0,004
$J_2^{средн}$	1,493	0,514	0,502	0,131	-0,004

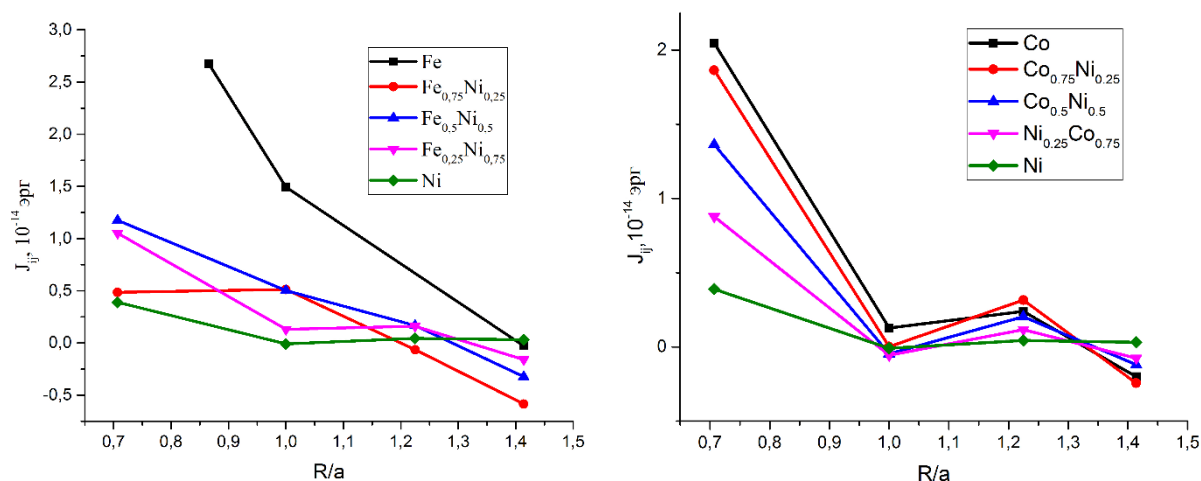


Рис. 1. Зависимость усредненных значений обменных интегралов от приведенного расстояния между атомами для соединений $Fe_{1-x}Ni_x$ и $Co_{1-x}Ni_x$.

В результате первопринципных расчетов были получены обменные интегралы для бинарных соединений. В таблице 3 представлены значения обменного интеграла для ближайших соседей J_1 и для следующих за ближайшими J_2 в зависимости от типов атомов. На рис.1 представлен график усредненной величины интеграла обменного взаимодействия в зависимости от приведенного расстояния между атомами.

В сплаве кобальт-никель с увеличением концентрации никеля обменное взаимодействие ближайших соседей кобальта с другими атомами увеличивается, а между атомами никеля уменьшается. Обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседями, при не нулевой концентрации Ni, имеет слабый антиферромагнитный характер. В сплаве железо-никель с увеличением концентрации никеля значения обменное взаимодействие железа с ближайшими соседями увеличивается, а между атомами никеля уменьшается. Из рисунка можно увидеть, что при концентрации никеля равное 0,25 значения интеграла для ближайших соседей J_1 и для следующих за ближайшими J_2 близки, это связано с метастабильной фазой структуры пермалоя. При любой концентрации Ni обменный интеграл меньше чем для чистого Fe.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (соглашение 23-22-00093).

- [1] Mamonova M.V., Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., J. Phys.: Conf. Ser. **1740**, 012006 (2021)
- [2] Kresse P. G., Furthmuller J., Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996)
- [3] Huhne T., Zecha C., Ebert H., Phys. Rev. B. **58**, 10238 (1998)
- [4] Vaz C.A.F, Bland J.A.C., Lauhoff G. Rep. Prog. Phys. **71**, 056501(2008)
- [5] Pajda M., Kudrnovsky J., Turek I., Drchal V. , Bruno P. Phys. Rev. B. **64**, 174402 (2001)

Влияние магнитного поля на магнитные и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Поттса

Мазагаева М.К.¹, Муртазаев А.К.^{1,2}, Магомедов М.А.^{1,2}, Рамазанов Р.М.²

¹*Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*

e-mail: mazagaeva86@mail.ru

²*Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия*

e-mail: sheikh77@mail.ru

Для исследования фазовых переходов (ФП), магнитных, термодинамических и критических свойств магнитных материалов в современной физике конденсированных сред используются различные решеточные модели. С помощью теоретических методов на простых решеточных моделях удается решить большое количество задач, имеющих широкие перспективы для практического применения. Примером может служить область создания технологических приложений, таких как квантовые компьютеры. Понимание последнего лежит и в основе описания разнообразных проблем [1].

При решении экспериментальных задач обнаружено, что разрушение порядка в двумерных ферромагнетиках является полным даже для слабых полей в измерениях [2-3]. Однако с другой стороны, антиферромагнетики активно изучаются как альтернатива ферромагнетикам для приложений спинтроники благодаря их устойчивости к возмущениям магнитными полями, отсутствию паразитных полей рассеяния и сверхбыстрой динамике [4]. В связи с этим вопрос исследования влияния магнитного поля на антиферромагнетики является наиболее актуальным.

Модель Поттса является одной из спиновых решеточных моделей. Данная модель описывает большой класс реальных физических систем, таких как адсорбированные пленки, слоистые магнетики и другие. Термодинамические и магнитные свойства модели Поттса зависят от влияния внешних возмущающих факторов, таких как конкурирующее обменное взаимодействие, внешнее магнитное поле, магнитные и немагнитные примеси, а также от геометрии решетки. На сегодняшний день антиферромагнитная модель Поттса на гексагональной решетке является мало изученной и для этой модели нет точно решенных задач. В связи с этим в данной работе нами изучается влияние внешнего магнитного поля на характер ФП, магнитные и термодинамические свойства двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с учетом обменных взаимодействий ближайших и вторых за ближайшими соседями реплечным обменным алгоритмом метода Монте-Карло.

Гамильтониан этой модели имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k - h \sum_{\langle i \rangle} S_i = \\
 &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k} - h \sum_{\langle i \rangle} S_i, \quad (1)
 \end{aligned}$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных антиферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для ближайших и следующих за ближайшими соседями, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$, h – величина магнитного поля (h приводится в единицах J_1). В данном исследовании рассматривается случай, когда $|J_1| = |J_2| = 1$. Величина внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \leq h \leq 1.0$ с шагом 0.5

Получены магнитные структуры основного состояния в широком интервале значений поля. Обнаружено, что в зависимости от величины магнитного поля в данной модели наблюдаются димерное упорядочение по шести спинам. Построен график зависимости намагниченности от величины поля. На данном графике наблюдается четыре плато намагниченности. На основе гистограммного метода проведен анализ характера ФП. Показано, что в интервале значений магнитного поля $0.0 \leq h \leq 9.0$ переход из разупорядоченной фазы в частично упорядоченную является ФП первого рода. Обнаружено, что в сильных полях $h \geq 1.0$ магнитное поле снимается вырождение основного состояния и фазовый переход в системе подавляется.

- [1] D. Silevitch, D. Bitko, J. Brooke, S. Ghosh, G. Aeppli, and T. Rosenbaum, A ferromagnet in a continuously tunable random field, *Nature* **448**, 567 (2007).
- [2] J. Z. Imbrie, Lower critical dimension of the random-field Ising model, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1747 (1984).
- [3] T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, *Nature Nanotechnology* **11**, 231 (2016).
- [4] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).

Одномерная модель Изинга в магнитном поле

Магомедов М.А., Муртазаев А.К.

Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: magomedov_ma@mail.ru

Низкоразмерные магнитные системы привлекают к себе внимание ученых достаточно давно. В последние годы ведутся активные исследования одномерных магнитных систем описываемых моделью Изинга. Отметим, что модель Изинга имеет точное решение в одномерном и двумерном случае. Однако добавление дополнительных обменных взаимодействий сильно усложняет задачу. В данной работе нами исследована одномерная модель Изинга с учетом конкурирующих обменных взаимодействий между ближайшими, следующими за ближайшими и третьими соседями, а также учитывается внешнее магнитное поле.

Гамильтониан исследованной системы может быть представлен в виде:

$$H = -J_1 \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} - J_3 \sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3} - h \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1)$$

где первая сумма учитывает взаимодействие между первыми ближайшими соседями, вторая сумма – между следующими за ближайшими, третья сумма – между третьими соседями, четвертая сумма учитывает взаимодействие спинов с внешним магнитным полем h .

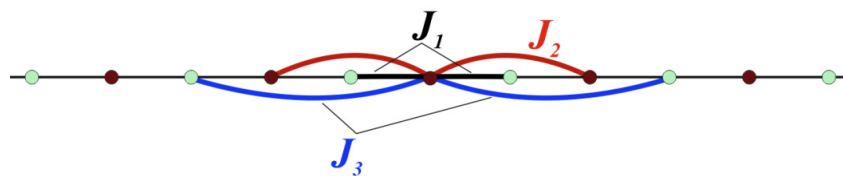


Рис. 1. Одномерная модель Изинга с учетом взаимодействия между ближайшими, вторыми и третьими соседями.

Схематически модель изображена на рисунке 1, где темными кружками условно обозначены спины, принимающие значение $S_i = +1$, а светлыми – спины со значением $S_i = -1$. Нами проведены исследования при различных соотношениях обменных параметров и магнитного J_1, J_2, J_3 поля h . В данной работе в основном приведены результаты для значений $J_1 = 1, J_2 = -1, J_3 = -1$.

Одним из наиболее эффективных алгоритмов для исследования низкоразмерных систем является репличный-обменный алгоритм метода Монте-Карло, который нами и был использован в данной работе в следующем виде:

1. Одновременно классическим алгоритмом Метрополиса моделируются N независимых копий системы – реплик с различными температурами T_1, T_2, \dots, T_N .
2. После выполнения каждого Монте-Карло шага на спин для всех пар соседних реплик X_i и X_{i+1} производится обмен данными с вероятностью:

$$w(X_i \rightarrow X_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{if } \Delta \leq 0 \\ \exp(-\Delta) & \text{if } \Delta > 0 \end{cases} \quad (2)$$

где $\Delta = (E_i - E_{i+1}) \cdot (1/T_i - 1/T_{i+1})$, E_i и E_{i+1} – энергии двух соседних реплик.

В репличном-обменном алгоритме каждая реплика совершает случайное блуждание в энергетическом пространстве. Число одновременно моделируемых реплик составляло 300, что является достаточно большой величиной и позволяет охватить весь интересующий нас температурный интервал.

На рисунке 2 приведена зависимость энергии системы E от внешнего магнитного поля при температуре $T=0.05$.

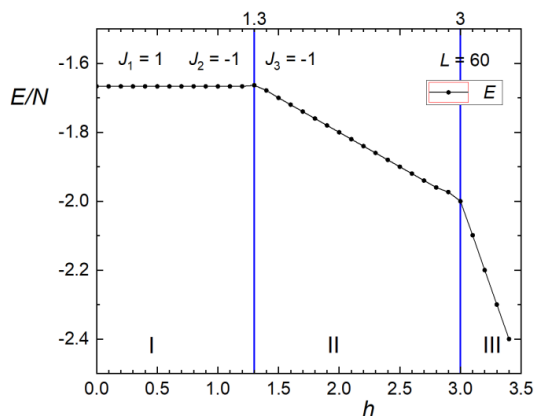


Рис. 2. Полевая зависимость энергии системы E .

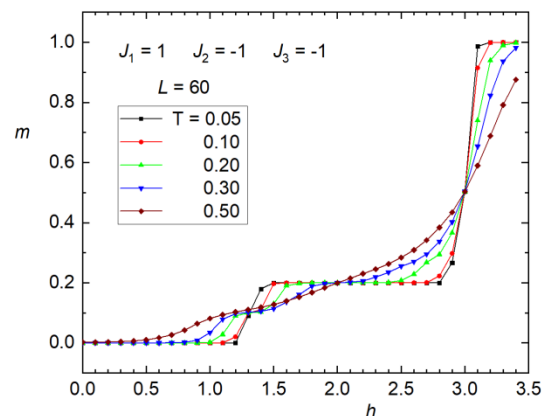


Рис. 3. Полевая зависимость намагниченности m .

На полевой зависимости намагниченности, приведенной на рисунке 3, наблюдаются три плато соответствующие трем видам упорядочений. На каждом плато намагниченность принимает значения $m = 0$, $m = 0.2$ и $m = 1$. Нами также определены магнитные структуры основного состояния при различных соотношениях обменных параметров и магнитного J_1, J_2, J_3 поля h . Рассчитаны температурные и полевые зависимости и других термодинамических параметров системы.

Исследование выполнено в рамках научной программы НЦФМ (проект «Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях»).

Особенности поведения наблюдаемых величин при наложении пластической деформации кручения в двухкомпонентных соединениях

Заворотнев Ю.Д.¹, Страумал Б.Б.^{2,3}, Томашевская Е.Ю.⁴

¹ Донецкий физико-технический институт им. Галкиной А.А. Донецк, ДНР
e-mail: zavorotnev.yurii@mail.ru

² Институт физики твердого тела РАН им. Ю.А. Осипьяна, Черногоровка

³ Национальный университет науки и технологий (МИСиС), Москва

⁴ Донецкий национальный университет экономики и торговли им. Михаила Туган-Барановского. Донецк, ДНР

При экспериментальном исследовании двухкомпонентных соединений Cu-Ag, Cu-Sn, Cu-Co было установлено, что независимо от температуры отжига система при наложении мегапластической деформации кручения приходила в одно определенное стационарное состояние [1]. В работе [2] были теоретически рассмотрены поведения размера элементарной ячейки при наложении кручения под высоким давлением (КВД) в двухкомпонентных растворах и было подтверждено наличие конечного стационарного состояния. Однако, при этом использовался только микроскопический (первичный) параметр порядка (ПП), а именно сдвиг атомов ячейки. В настоящей работе рассмотрен также макрокоскопические (вторичные) ПП - компоненты симметричного тензора деформации.

Неравновесный термодинамический потенциал (НТДП) был построен на основе целого рационального базиса инвариантов для векторов и тензоров второго ранга. В результате вычислений и упрощений получаем, что для кубического кристалла НТДП имеет вид

$$\Phi = -\frac{\alpha_1}{2}q^2 + \frac{\alpha_2}{4}q^4 + \frac{\alpha_3}{6}q^6 + \beta_1\varphi + \frac{\beta_2}{2}\varphi^2 + \frac{\beta_3}{3}\varphi^3 + \delta q^2\varphi + \gamma_1 M^s \left(q_x \frac{\partial q_y}{\partial z} - q_y \frac{\partial q_x}{\partial z} \right) + \gamma_2 M^r \left[\left(\frac{\partial q_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial q_y}{\partial z} \right)^2 \right] + q^2 (\theta_1 \varepsilon_{zx}^2 + \theta_2 \varepsilon_{zx}^4) + \gamma_3 \left(\frac{\partial \varepsilon_{zx}^2}{\partial z} \right)^2 + \Phi_1$$

где q – структурный параметр порядка (изменение одного из линейных размеров элементарной ячейки), φ – плотность дефектов, M – момент кручения, направленный по оси z , $\alpha, \beta, \gamma, \theta$ – феноменологические константы, слагаемое с коэффициентом γ_3 описывает флуктуации распределения величины тензора деформации, Φ_1 - вид этого слагаемого зависит от поставленной задачи. Зависимость величины момента от числа оборотов N имеет вид гиперболического тангенса. Конкуренция слагаемых с производными в скобках обеспечивает появление длиннопериодической структуры при наложении КВД.

1. Рассмотрим поведение ПП кристалла q без учета деформации. Пусть процесс КВД равномерный. Тогда q можно считать зависящим только

от числа оборотов N , т.е. $q = q(N)$. Система уравнений Эйлера для потенциала имеет вид

$$\begin{cases} 2\gamma_2 M^s \frac{\partial^2 q_x}{\partial z^2} - 2\gamma_1 \frac{\partial q_y}{\partial z} + \alpha_1 q_x - \alpha_2 q_x^2 - \alpha_3 q_x^4 - 2\delta q_x \phi = 0, \\ 2\gamma_2 M^s \frac{\partial^2 q_y}{\partial z^2} + 2\gamma_1 \frac{\partial q_x}{\partial z} + \alpha_1 q_y - \alpha_2 q_y^2 - \alpha_3 q_y^4 - 2\delta q_y \phi = 0. \end{cases}$$

Решение этой системы имеет

$$q^2 = \frac{-\alpha_2 + \sqrt{\alpha_2^2 + 4\alpha_3 \left(\alpha_1 - 2\delta_1 \phi + \frac{\gamma_1^2 M^{2r-s}}{2\gamma_2} \right)}}{2\alpha_3}.$$

Поведение зависимостей $q = q(N)$ различно. При температуре отжига 570°C кривая монотонно уменьшается, а при 1060°C – монотонно возрастает. Такое поведение приводит к выводу, что существует температура, при которой решеточный параметр при кручении не изменяется. Поскольку соответствующие экспериментальные данные отсутствуют, в силу симметричности приведенных кривых можно предположить, что

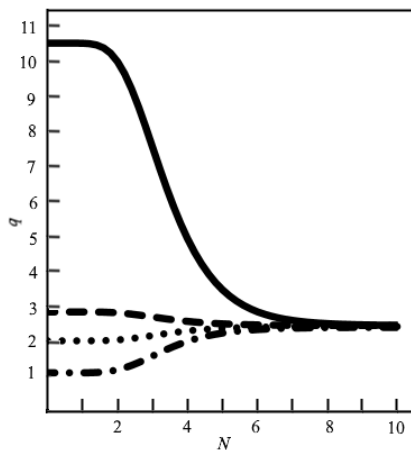


Рис.1. Зависимости $q(N)$ как функции от начальных условий при заданных значениях температуры отжига T_{ann} , $^\circ\text{C}$: — — 570, \cdots — 700, --- — 1050. Величины q и N в относительных единицах

искомая критическая температура $T_{\text{cr}} \approx 750^\circ\text{C}$. Как следует из (11), такое поведение возможно только при изменении знака коэффициента γ_2 при прохождении образца через T_{cr} . В этой точке функция $\gamma_2(T_{\text{ann}})$ должна иметь разрыв первого рода. Для расчетов была выбрана следующая аппроксимация:

$$\gamma_2 = \sigma_4 (750 - T_{\text{ann}})^{-1},$$

где σ_4 – феноменологический параметр, который подбирался для наилучшего согласия экспериментальных и теоретических результатов.

Рассмотрим совместное поведение первичного и вторичного ПП в случае, когда распределение деформации в образце однородно и $\gamma_3 = 0$. При этом были рассмотрены ситуации: 1) в полученных образцах при любой температуре отжига отсутствует сдвиговое напряжение; 2) величина ε_{xz} меняется при изменении температуры закалки ввиду наличие взаимодействия со структурным параметром порядка; 3) совместное воздействие ПП и момента вращения на сдвиговую деформацию.

1. Тогда имеем ($\theta_1 = 0$) $\Phi_1 = [\chi_1 \varepsilon_{xz}^2 + \chi_2 \varepsilon_{xz}^4 + \chi_3 \varepsilon_{xz}^8] M^4$. На рис.2 показаны

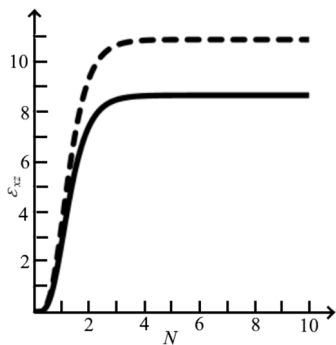


Рис.2. Зависимости величины сдвиговой деформации от числа оборотов при разных температурах отжига. Сплошная линия – 570°C, пунктирная – 950°C

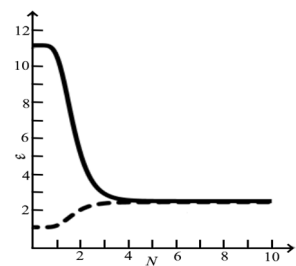


Рис.3. Поведение величины сдвиговой деформации в случае $\theta_1 > 0; \theta_2 < 0$

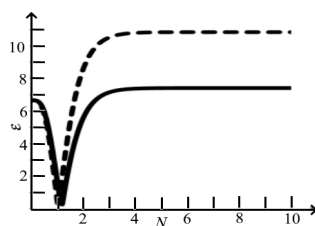


Рис.4. Поведение величины сдвиговой деформации в случае $\theta_1 > 0$

соответствующие изменения сдвиговой деформации. Видно, что кривые являются монотонно возрастающими. Однако, они имеют разные максимумы. Это различие обусловлено тем, что крутящий момент обратно пропорционален температуре закалки [1-3]. Это различие и приводит к появлению разных сдвиговых деформаций при разных температурах закалки. Необходимо отметить, что в отличие от ПП в стационарной области значения величин сдвиговой деформации различны.

2. Пусть в отсутствие момента имеют место различные значения ε_{xz} , зависящие только от первичного ПП. В этом случае ($\theta_1 \neq 0$) $\Phi_1 = [\chi_1 \varepsilon_{xz}^2 + \chi_2 \varepsilon_{xz}^4 + \chi_3 \varepsilon_{xz}^8]$. На рис.3 показана эволюция вторичного параметра порядка. При $\theta_1 > 0; \theta_2 > 0$ график инвертируется.

3. На рис.4 показан возможный вариант поведения сдвиговой деформации при учете всех взаимодействий. Ввиду избыточного напряжения при $M=0$, на начальном участке в образце происходит частичное снятие величины первичной сдвиговой

деформации. При этом напряжение и величина ε_{xz} уменьшаются, а затем имеет место их рост и переход в стационарной состоянии.

- [1] Б.Б. Страумал, А.Р. Кильмаметов, А.А. Мазилкина, А.С. Горнакова, О.Б. Фабричная, М.Й. Кригель, Д. Рафайя, М.Ф. Булатов, А.Н. Некрасов, Б. Барецки. Письма в ЖЭТФ, **111**, 674 (2020).
- [2] В.В. Straumal, A. R. Kilmertov, Anna Korneva, P. Zieba, Yuri Zavorotnev, Leonid Metlov, Olga Popova, Brigitte Baretzky. Crystals. **11**, 766 (2021).

Компьютерное моделирование мартенситных фазовых переходов, обусловленных пластической деформацией и лазерным воздействием в сплавах Гейслера

Метлов Л.С.^{1,2}, Блинова Е.Н.³, Либман М.А.³, Коледов В.В.⁴, Шавров В.Г.⁴

¹ ГБУ “Донецкий физико-технический институт им ак. А.А. Галкина” РАН,
Донецк, Россия

e-mail: lsmet@donfti.ru

² Донецкий Национальный Университет, Донецк, Россия

³ Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии
им. И. П. Бардина, Москва

⁴ Институт радиотехники и электроники им. А.А. Котельникова РАН, г. Москва

Мартенситные фазовые переходы свойственны, как для сталей [1-5], так и для сплавов, обладающих эффектом памяти формы [6-8]. В последнее время большой интерес представляет создание в таких сплавах неоднородных структур, состоящих из областей аустенита, сформированных с помощью локального лазерного воздействия в мартенситной матрице [5, 9–12]. Вначале материал, находящийся после выплавки и горячей пластической деформации в аустенитном состоянии, с помощью холодной прокатки (растягивающая сила) с большими степенями обжатия переводили в мартенситное состояние. После некоторой релаксации образец подвергали локальному лазерному нагреву в интервале температур обратного мартенситного превращения, что переводило его снова в аустенитное состояние. Затем образец охлаждался до исходной температуры, оставаясь при этом в аустенитном состоянии. Весь цикл преобразований материала возможен, если исходная температура образца находится в области сосуществования аустенитной и мартенситной фаз.

Авторами настоящей работы ранее на примере сплавов типа Гейслера была рассмотрена структурная часть задачи, однако, возможное влияние магнитной подсистемы на рассматриваемые переходы не было изучено [13]. Рабочие формулы и параметры задачи приведены в работах [6–8, 13], здесь же мы остановимся лишь на результатах расчетов и их интерпретации. При этом состояние системы будет характеризоваться двумя деформационными параметрами порядка e_2 , e_3 и тремя компонентами магнитного момента m_1 , m_2 , m_3 [6–8, 13].

Рассмотрим случай, когда температуры мартенситного и магнитного фазовых переходов сильно различаются между собой $T_M = 150$ К, $T_c = 250$ К (рис. 1 и рис.2). На рисунках римскими цифрами обозначены следующие области: I – область релаксации из произвольного начального состояния в аустенитное состояние, II – область сжатия образца с переходом образца в одно из мартенситных состояний, III – область релаксации после прекращения действия внешней сжимающей силы, когда образец остается в

мартенситном состоянии, IV – область лазерного разогрева образца, когда образец снова переходит в аустенитное состояние и V – область охлаждения образца до начальной температуры.

В компьютерном эксперименте, приведенном на рис. 1, начальная температура образца составляла 155 К, то есть, была равна температуре, при которой глубины аустенитного и трех мартенситных минимумов равны между собой. вследствие этого оба состояния, аустенитное и мартенситное, оказываются одинаково устойчивы.

Из рисунка видно, что информативный деформационный параметр ϵ_3 не равен нулю на этапах II и III, что соответствует формированию мартенситного состояния при механическом сжатии и обращается в ноль в области лазерного нагрева IV. Магнитный параметр порядка, практически, никак не реагирует на внешние воздействия на этапах I – III и лишь немного уменьшается на стадии лазерного нагрева IV, что вполне соответствует природе параметра прядка: Равенство компонент

магнитного момента по абсолютной величине означает, что он направлен вдоль одной из главных диагоналей куба элементарной ячейки.

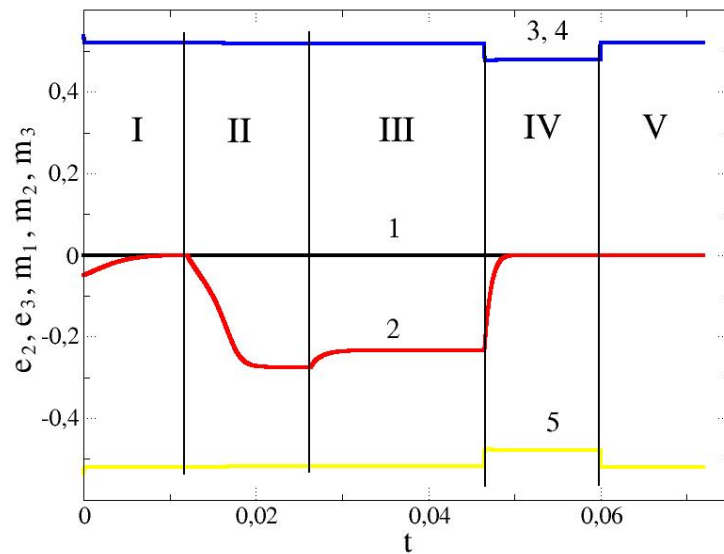


Рис.1 Эволюция параметров порядка на различных стадиях воздействия на образец с начальной температурой 155 К. Здесь цифры обозначают 1, 2 – e_2, e_3 , 3, 4, 5 – m_1, m_2, m_3 , соответственно.

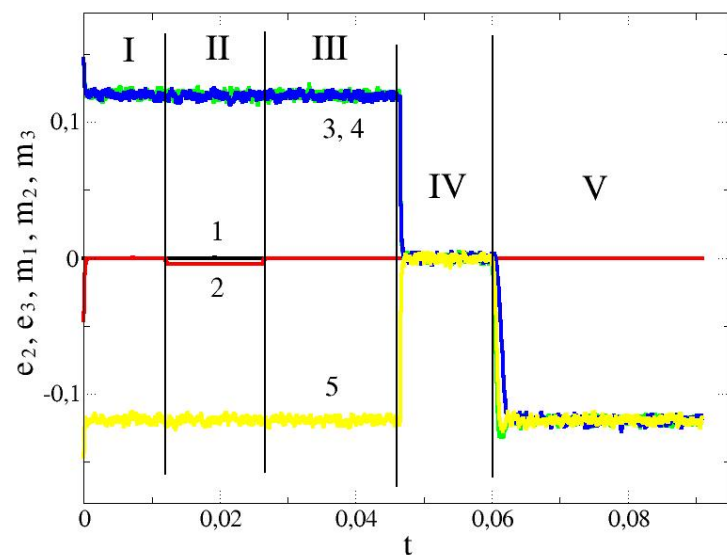


Рис.2 Эволюция параметров порядка на различных стадиях воздействия на образец с начальной температурой 245 К. Обозначения те же, что на рис. 1

При начальной температуре 245 К, наоборот, деформационный параметр порядка e_3 очень слабо меняется лишь на стадии II, что связано с чисто механической поляризацией в результате внешнего механического воздействия без перехода в мартенситную фазу. Магнитный же параметр порядка при лазерном нагреве на стадии IV успевает обратиться в ноль и система переходит в парамагнитное состояние. При охлаждении до начальной температуры 245 К система возвращается в ферромагнитное состояние, однако, за счет влияния случайных флуктуаций магнитный момент оказывается направлен вдоль другой главной диагонали куба.

Расчеты также показывают, что при более близких температурах мартенситного и магнитного переходов, например, при $T_M = 150$ К, $T_C = 163$ К такой цикл внешнего воздействия может приводить к одновременному переходу на стадии IV в аустенитное и парамагнитное состояние.

- [1] Б.М. Эфрос, В.В. Березовская, И.П. Конакова, Я.Е. Бейгельзимер, Н.Б. Эфрос, В.С. Тютенко, ФТВД **10**, 3, 28 (2000).
- [2] Н.Б. Эфрос, В.П. Пилюгин, Б.М. Эфрос, А.М. Пацелов, Е.Г. Чернышев, Л.В. Лоладзе, ФТВД **14**, 3, 82 (2004).
- [3] A.I. Deryagin, V.A. Zavalishin, V.V. Sagaradze, V.N. Varyukhin, B.M. Efros, Russian Metallurgy, **6**, 478 (2005).
- [4] Н.Б. Эфрос, Л.В. Лоладзе, С.Б. Эфрос, Л.Г. Коршунов, Б.М. Эфрос, ФТВД **21**, 1, 88 (2011).
- [5] Е. Н. Блинова, М.А. Либман, В.Н. Петровский, Е.В. Пименов, П.П. Умнов, В.П. Филиппова, Т.Р. Чуева, Н.А. Шурьгина, Известия РАН. Серия физическая. **85**, 7, 984 (2021).
- [6] A.N. Vasil'ev, A.D. Bozhko, V.V. Khovailo, I.E. Dikshtein, V.G. Shavrov, V.D. Buchelnikov, M. Matsumoto, S. Suzuki, T. Takagi, J. Tani, Phys. Rev. B **59**. 1113 (1999).
- [7] Л.С. Метлов, ФТВД **29**, No 1, 28 (2019).
- [8] Л.С. Метлов, В.В. Коледов, В.Г. Шавров, Ю.В. Тхетелев, А.Г. Петренко, ФТВД **31**, 2, 28 (2021).
- [9] М.П. Галкин, М.А. Либман, Э.И. Эстрин, Материаловедение. **3**. 25 (2014).
- [10] А.О. Андреев, М.П. Галкин, М.А. Либман, В.Д. Миронов, В.Н. Петровский, Э.И. Эстрин, МиТОМ. 2014. №1. С. 50.
- [11] E.N. Vlinova, A.M. Glezer, M.A. Libman, E.I. Estrin, Russian Physics Journal. **57**, 4, 429 (2014).
- [12] Е. Н. Блинова, М.А. Либман, В.Н. Петровский, Е.В. Пименов, Сталь. **11**, 46 (2021).
- [13] Л.С. Метлов, Е. Н. Блинова, М.А. Либман, ФТВД **33**, 1, 65 (2023).

Критическое поведение часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке

Бадиев М.К., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К.

Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: m_zagir@mail.ru

Для изучения фазовых переходов (ФП) и особенностей термодинамического и критического поведения магнитных спиновых систем успешно используются различные решеточные модели. На их основе получено большое количество интересных результатов [1–4].

Одной из моделей применяемых для описания физических систем, является часовая модель с различным числом состояний спина q . Многие физические свойства в рассматриваемой модели зависят от значения q . В случае, когда $q = 2, 3, 4$ эта модель имеет точное решение. Часовая модель сводится к модели Изинга и Z_3 модели Поттса при $q = 2$ и 3 , соответственно. При $q = 4$ данная модель эквивалентна двум копиям модели Изинга. Установлено, что для этих трех случаев в системе наблюдается ФП второго рода из высокотемпературной парамагнитной фазы в низкотемпературную ферромагнитную упорядоченную фазу. Когда $q \rightarrow \infty$ данная модель сводится к стандартной XY модели. В этом случае спонтанного нарушения симметрии не наблюдается, но происходит ФП из низкотемпературной фазы Березинского-Костерлица-Таулеса (БКТ) в высокотемпературную парамагнитную фазу. Для часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ имеется очень мало точно установленных фактов. К настоящему моменту времени остается открытым вопрос о роде ФП при значении $q = 5$.

Для получения ответа на этот вопрос, в данной работе нами проводится исследование двумерной часовой модели на треугольной решетке с $q = 5$. Исследование этой модели с антиферромагнитными обменными взаимодействиями на треугольной решетке в литературе практически не встречается. Антиферромагнитное обменного взаимодействия в данной модели может привести к фрустрации, вырождению основного состояния, появлению различных фаз и ФП, а также влиять на его термодинамические, магнитные и критические свойства. В связи с этим в данной работе нами предпринята попытка провести исследование ФП и термодинамических свойств этой модели на треугольной решетке.

Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с природой ФП и термодинамическим поведением фрустрированных спиновых систем.

Гамильтониан для часовой модели с q -состояниями, которая представляет собой дискретизированную спиновую XY модель, можно записать в следующем виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

где спиновые состояния q в узле i обозначены плоским углом $\theta_i = 2\pi k_i/q$, $k_i = 1, \dots, q$. Нами были рассмотрены два случая. В первом случае $J > 0$ – параметр ферромагнитного обменного взаимодействия, а во втором случае $J < 0$ – параметр антиферромагнитного обменного взаимодействия.

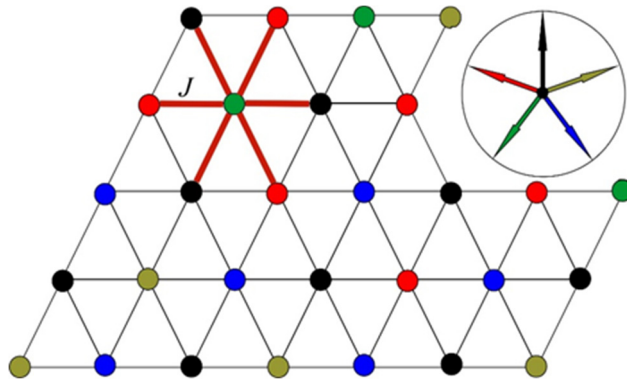


Рис.1. Схематическое представление часовой модели с $q=5$.

Схематическое описание этой модели представлено на рис. 1.

На вставке приведены направления для каждого из 5 состояний спина и соответствующее цветовое представление. Как видно на рисунке, у каждого спина есть шесть (линии красного цвета) соседа. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление.

Для исследования подобных систем в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов. Одним из наиболее эффективных для исследования таких систем является алгоритм Ванга-Ландау [5]. Результаты нашей работы получены с использованием выше приведенного алгоритма.

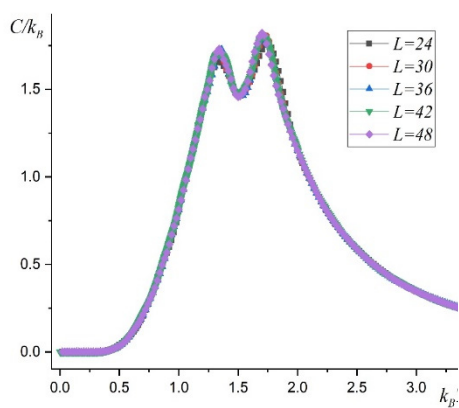


Рис.2. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/J$ для ферромагнитной модели.

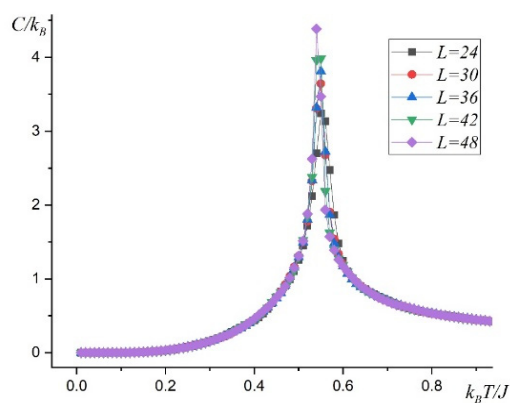


Рис.3. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/J$ для антиферромагнитной модели.

На рис. 2 и 3 представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры для систем с различными линейными размерами L . Отметим, что для ферромагнитной модели на зависимостях теплоемкости C от температуры для всех систем вблизи критической температуры

наблюдаются два хорошо выраженные максимумы. Наличие двух максимумов на температурной зависимости теплоемкости позволяет говорить о двух последовательных ФП в данной модели. Аналогичный результат был получен в работах [4], где была исследована ферромагнитная часовая модель с $q = 5$ на квадратной решетке. Для антиферромагнитной модели наблюдается только один максимум, что позволяет говорить об одном ФП. Все максимумы увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем они в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением L . Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности использованного способа добавления периодических граничных условий, а во-вторых, о достижении насыщения по N для многих исследуемых нами параметров.

Анализ полученных данных показывает, что для ферромагнитной часовой модели на температурной зависимости теплоемкости наблюдаются два максимума. На основе метода кумулянтов Биндера и гистограммного метода проведен анализ рода ФП исследуемой модели. Обнаружено, что для ферромагнитной часовой модели происходят два фазовых перехода типа Березинского-Костерлица-Таулеса. Данные полученные для антиферромагнитной часовой модели свидетельствуют о том, что данная модель сильно вырождена и в системе происходит ФП второго рода. Показано, что антиферромагнитное обменное взаимодействие ближайших соседей может повлиять на физические свойства часовой модели с $q=5$.

- [1] С.Е. Коршунов. УФН **176**, 233 (2006).
- [2] P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto et al., Phys. Rev. B **70**, 174 (2004).
- [3] М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов и др., ЖЭТФ **161**, 753 (2022).
- [4] Li Zi-Qian, Li-Ping Yang, Z. Y. Xie, et al., Phys. Rev. E **101**, 060105R, (2020).
- [5] F. Wang, D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).

Electronic properties of point defects in CdGa₂Se₄ mathematical calculation

Mustafabeyli A.Sh., Ibragimov GB

Institute of Physics, ANAS, Baku, AZ-1143, Azerbaijan

Chalcogenide compounds are the most studied crystals among semiconductors. The reason why they are widely studied is because they have different functional properties. Therefore, the electronic and crystal structures of these crystals are widely studied experimentally and theoretically [1-5]. The CdGa₂Se₄ compound occupies a special place among chalcogenides. Ternary CdGa₂Se₄ semiconductor compounds crystallize in tetragonal (space group $\bar{1}4$) symmetry they belong to the group of A₂B₃₂C₆₄ crystals, and crystallizing in the structure of sphalerite and chalcopyrite. Cadmium thiogallates CdGa₂X₄ (X: S, Se) have a defect chalcopyrite structure, in which one of the cation sites is vacant (Fig. 2(a)).

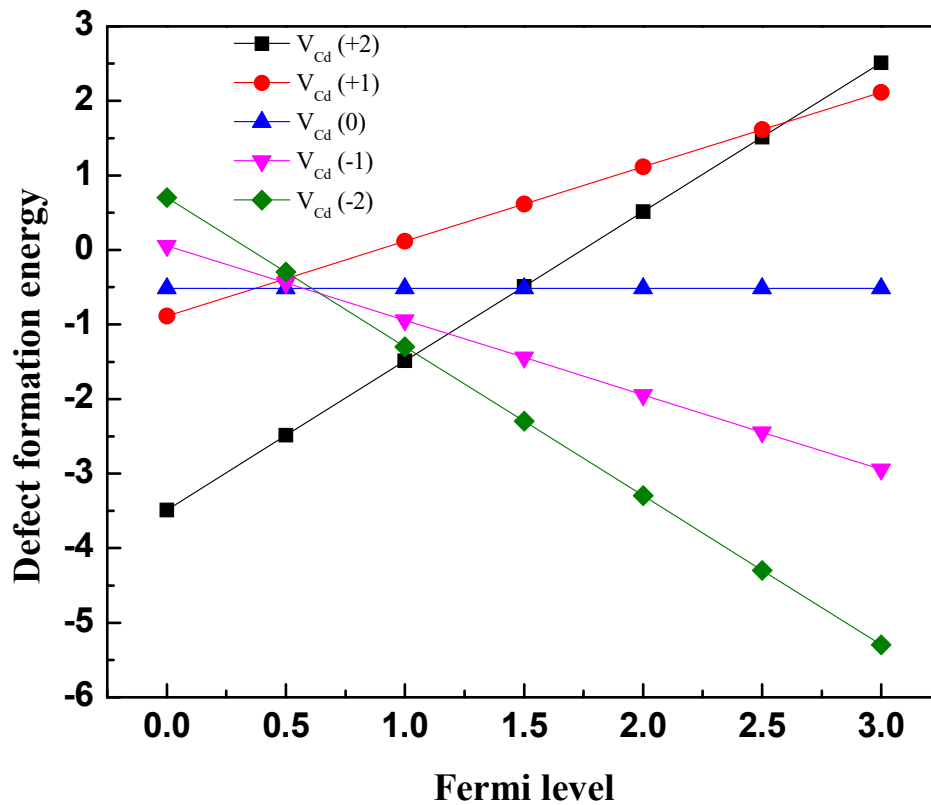


Fig 1. Dependence of DFE of vacancy V_{Cd} on charge states as a function Fermi energy for supercell consisting of 56 atoms.

Presented first-principles studies of point defects in CdGa₂Se₄ chalcopyrite are reviewed to quantify the formation energies of three possible vacancy-defect models Cd, Ga and Se using various approaches including the local density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA) to DFT. As we already know, radiation detection requires high resistivity and good carrier

transport. To this end, shallow donors and acceptors should usually be used to carrier compensation and to avoid deep centers that are effective carrier traps. Our calculations make it possible to investigate how point vacancies affect the Fermi level pinning in the semiconductor band gap. With the increase in the Fermi level, VCd formation energy approaches that of the 2- charge state, and above the Fermi level of 1.3 eV, the -2 state becomes preferable and until the end remain stable in -2 charge state. (+2/-2=1.2eV). Calculation show that Ga vacancy exclusively exhibits the -2 charge state irrespective of the value of the Fermi level and, therefore, no thermodynamical transition levels appear in the band gap. For Se vacancy +2 state is stable for Fermi level below 1.1 eV. As the Fermi level increases, the +2 charge state is transfer to the -2 charge state and remains stable regardless of the further increase in the Fermi level (Fig1).

- [1] A.O. Dashdemirov, S.G. Asadullayeva, A.S. Alekperov, N.A. Ismayilova, S.H. Jabarov, International Journal of Modern Physics B, 35, 30, pp.2150305, 2021.
- [2] S.H. Jabarov, Y.I. Aliyev, T.M. Ilyasli, A.A. Baylarova, A.O. Dashdemirov, V.I. Nasirov, N.A. Ismayilova, G.M. Aghamirzayeva, M.N. Mirzayev, Integrated Ferroelectrics, 221, pp.180-185, 2021.
- [3] N.A. Ismayilova, Advanced Physical Research, 4, 1, pp.56-59, 2022.
- [4] Y.I. Aliyev, N.A. Ismayilova, R.F. Novruzov, A.O. Dashdamirov, H.J. Huseynov, S.H. Jabarov, A.A. Ayubov, Modern Physics Letters B, 33, 21, pp.1950242, 2019.
- [5] N.A. Ismayilova, S.H. Jabarov, Optoelectronics and Advanced Materials-Rapid Communications, 11, 5-6, pp.353-356, 2017.

Расчет относительных дисперсий намагниченности, теплоемкости и восприимчивости в двумерной слабо разбавленной модели Поттса

Атаева Г.Я.¹, Бабаев А.Б.^{1,2}, Муртазаев А.К.^{1,3}, Абуев Я.К.¹, Бабаев М.А.³

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

²Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия

³Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

E-mail: ataeva20102014@mail.ru

В современной физике конденсированного состояния произошло смещение акцентов в область микромасштабов, что вызвало необходимость понимания явлений, связанных с наличием примесей и других дефектов структуры [1,2]. Имеются основания предполагать, что критические параметры исследуемой системы могут зависеть от способа реализации беспорядка. В частности, в работах [3, 4] было обнаружено, что беспорядок, реализованный каноническим способом (фиксацией доли магнитных узлов), приводит к результатам, отличным от случая, когда беспорядок реализовался способом большого канонического типа (доля магнитных узлов в каждой примесной конфигурации флуктуирует). Позже в работе [5], с применением ренормализационной группы, такое поведение объяснило различием конечно-размерных эффектов в этих двух типах разбавления. К настоящему времени эти вопросы достаточно хорошо не исследованы. Особенно применительно к решеточным моделям Поттса и вызывают большой теоретический и экспериментальный интерес. Не выяснены особенности распределения термодинамических параметров по соответствующему ансамблю в зависимости от размеров L исследуемых систем. Строгое исследование таких закономерностей в ближайшее время возможно лишь на основе данных численного эксперимента и практически невозможно другими методами.

В данной работе исследуется проблема самоусреднения термодинамических критических параметров в q -компонентных моделях Поттса на квадратной решетке в слабо разбавленном режиме с применением метода Монте-Карло (где $q=3$ и $q=4$). Гамильтониан системы может быть представлен в следующем виде [6]

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = P_1, P_2, P_3, P_4 \quad (1)$$

где J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей, $\rho_i=1$, если узел i занят магнитным атомом, и $\rho_i=0$, если в i узле немагнитный примесь, P_i - обозначение числа состояния i -ого спина. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрации спинов $p=1.0, 0.90, 0.80$. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L = N, L=10-160$.

Для расчета относительных дисперсий (квадратов коэффициентов вариации) намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_c в зависимости от линейных размеров L исследуемой системы использовались выражения

$$R_m = \frac{\overline{m^2(L)} - \overline{m(L)}^2}{\overline{m(L)}^2}, \quad (2)$$

$$R_\chi = \frac{\overline{\chi^2(L)} - \overline{\chi(L)}^2}{\overline{\chi(L)}^2}, \quad (3)$$

$$R_c = \frac{\overline{c^2(L)} - \overline{c(L)}^2}{\overline{c(L)}^2}, \quad (4)$$

Численные данные в критической точке T_c , рассчитанные по выражениям (2)–(4), позволяют судить о закономерности самоусреднения термодинамических величин и их погрешности в зависимости от L . На рис. 1

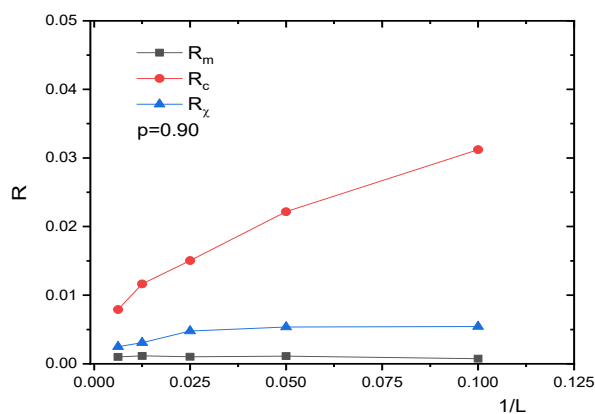


Рис. 1. Зависимость дисперсий R_m , R_c и R_χ от обратных размеров $1/L$ при $p=0.90$ и $T=T_c$.

приведены дисперсии R_m , R_c , R_χ в зависимости от $1/L$. Как видно из рисунка с увеличением линейных размеров, значения R_m , R_c , R_χ заметно уменьшаются.

В результате исследования были получены, относительные дисперсии намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_c в зависимости от линейных размеров системы L при концентрации спинов $p=0.90, 0.80$.

Полученные данные свидетельствуют о том, что внесение

слабого беспорядка в виде немагнитных примесей в двумерных моделях Поттса с $q=3$ и $q=4$ приводят к значениям R_m , R_χ , и R_c отличным от нуля, что свидетельствует о плохом самоусреднении исследуемых термодинамических параметров. Установлено, что заметное уменьшение R_m , R_χ , R_c происходит только при $L>90$. Для получения достоверных характеристик для этих моделей с применением метода Монте-Карло необходимо изучать спиновые системы с линейными размерами $L>90$.

- [1] R.Folk, Y.Golovach, and T.Yavorsky, *Adv. Phys. Sci.* **173**, 175 (2003).
- [2] A.K.Murtazaev, A.B.Babaev, G.Ya.Ataeva, A.A.Murtazaeva, *Low Temp. Phys.* **47**, 136 (2021).
- [3] S.Wiseman, E.Domany, *Phys. Rev. E* **58**, 2938 (1998).
- [4] S.Wiseman, E.Domany, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 22 (1998).
- [5] A.Aharony, A.B.Harris, S.Wiseman, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 252 (1998).
- [6] F.Y.Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).

Теоретическое и экспериментальное исследование соединений 3d-металлов с РЗМ и ЩЗМ синтезированных при высоком давлении

Магницкая М.В., Боков А.В., Саламатин Д.А.,
Щелкачев Н.М., Цвященко А.В.

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

Среди интерметаллических соединений широко распространены топологически плотноупакованные фазы Лавеса с общей химической формулой AB_2 . Материалы на их основе используются в качестве емкостей для хранения водорода, в качестве магнитомеханических датчиков и приводов, а также для износостойких и коррозионно-стойких покрытий в агрессивных средах и при высоких температурах [1]. Представлено совместное теоретическое и экспериментальное исследование магнитных свойств и сверхтонких взаимодействий в соединениях на основе фазы Лавеса $R(T_{1-x}T_2)_2$, где R — щелочноземельный или редкоземельный элемент, $T = \text{Fe, Co, Ni}$. Отметим, что некоторые из них могут образоваться только в условиях высокого давления и высокой температуры, характерных для недр Земли.

Синтез в условиях высоких давлений P и температур T – эффективный метод создания новых материалов. Высокое давление вызывает изменение химической связи, вследствие чего могут возникать необычные соединения между элементами, которые при нормальных условиях не реагируют между собой. Так, щелочные и щелочноземельные металлы (ЩМ и ЩЗМ) К, Mg, Са... могут образовывать под давлением устойчивые упорядоченные

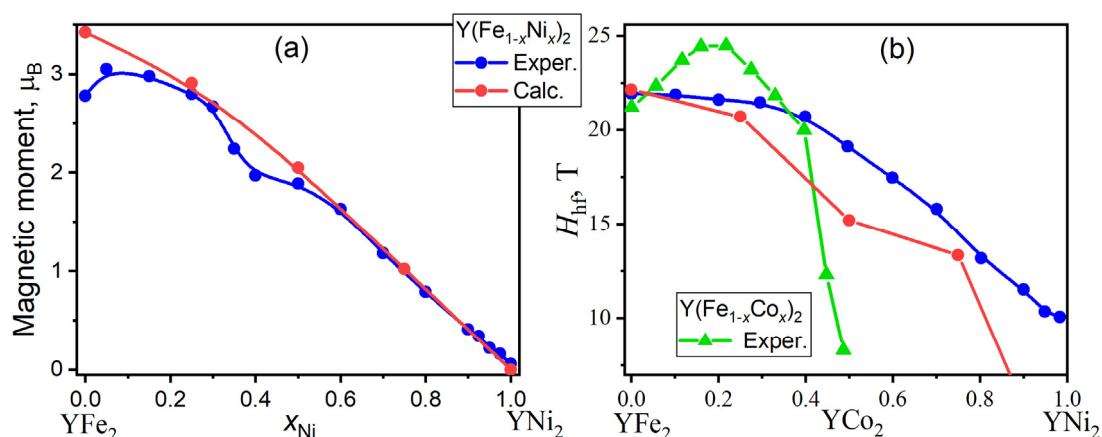


Рис. 1. Магнитный момент на ячейку (a) и сверхтонкое поле H_{hf} на ядре Fe (b) в $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ как функция x . Результаты измерений и расчетов показаны синим и красным цветом. Зеленая линия – данные для $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2$ [3].

соединения с 3d-металлами (см., например, [2]). Изучение таких систем, содержащих металлы группы железа, представляет интерес для физики и химии твердого тела, а также для физики Земли, ядро которой состоит в основном из железа и железо-никелевых сплавов.

Несколько непрерывных рядов квазибинарных соединений $R(T1_{1-x}T2_x)_2$ были синтезированы под высоким давлением $P \sim 8$ ГПа в широком диапазоне концентраций $0 \leq x \leq 1$ (метод синтеза описан, например, в [4]). Установлено, что полученные фазы кристаллизуются в кубической структуре типа $MgCu_2$ (C15).

Выполнены мёссбауэровские измерения на ^{57}Fe для $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ (иттрий обычно считается редкоземельным элементом из-за его физико-химических свойств). Мы также провели *ab initio* расчеты методом функционала электронной плотности с помощью пакета Wien2k [5]. Расчеты частично неупорядоченных псевдобинарных сплавов проводились путем моделирования их электронной структуры структурой гипотетических упорядоченных тройных соединений той же стехиометрии. Вычисленные магнитные моменты и сверхтонкие магнитные поля хорошо согласуются с экспериментом. (рис. 1), результаты опубликованы в [6].

Ранее нами были впервые синтезированы при $P \sim 8$ ГПа и $T \sim 1000$ К неизвестные в природе соединения $CaCo_2$ [2] и $Ca(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ с $x \sim 0.38$ [7] со структурой кубической фазы Лавеса C15, тип $MgCu_2$ (рис. 2). Однако составы с более высоким содержанием Fe, в том числе наиболее интересное для геофизики соединение $CaFe_2$, при 8 ГПа не образовывались. Простые эмпирические предположения, учитывающие упорядочение материалов в «химическом пространстве» по атомным свойствам (таким как размер и электроотрицательность), позволяют заключить, что для их образования требуются более высокие давления. Для теоретического предсказания диапазонов давлений, в которых они устойчивы по отношению к распаду на компоненты, был использован эффективный подход, существенно упрощающий эту задачу: эволюционный поиск энергетически выгодных фаз с использованием кода USPEX [8] в сочетании с пакетом VASP [9] для *ab initio* DFT-расчетов. Рассмотрен диапазон давлений до 40 ГПа.

Согласно нашим расчетам, магнитное соединение $CaCo_2$ со структурой C15 стабилизируется при ~ 4.5 ГПа, и только при $P \sim 18.6$ ГПа образуется магнитная фаза C15- $CaFe_2$. Это соответствует результатам работ [2, 7], где при 8 ГПа был получен $CaCo_2$ и не был получен $CaFe_2$.

Альтернативные гексагональные лавес-фазы C14 также образуются в этих системах под давлением, но они неустойчивы относительно фаз C15. Для всех найденных фаз энергия формирования с ростом давления понижается, т.е. по мере сжатия, их образование становится все более выгодным.

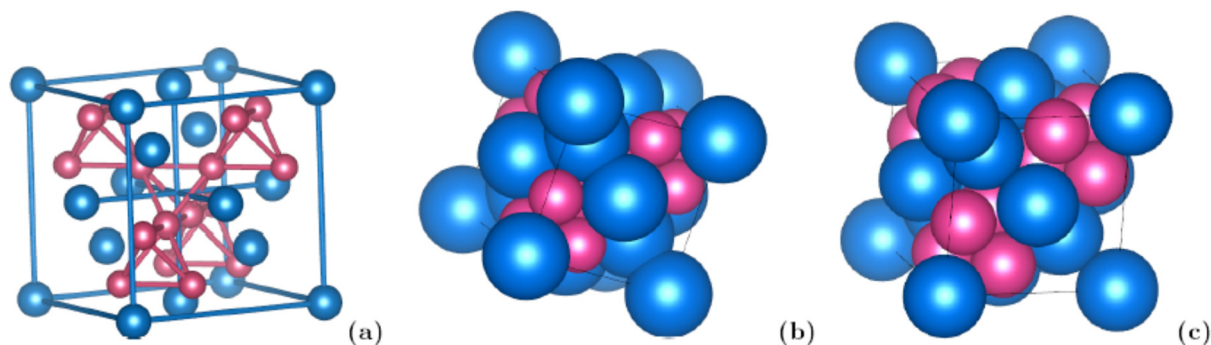


Рис. 2. (a) Лавес-фаза AB_2 типа $C15$, атомы A и B показаны синим и розовым цветом. (b, c) Плотнейшая упаковка в $C15$ шаров, отвечающих размерам атомов Ca и $3d$. Соединение не образуется при $P \approx 0$, так как отношение радиусов R_{Ca}/r_{3d} слишком велико – видна деформация атомов Ca (b) и образуется под давлением $10\text{--}20$ ГПа, когда размеры атомов сближаются (c).

Образование соединений Ca с $3d$ -металлами под давлением связано с высокой сжимаемостью Ca , которая приводит, помимо уменьшения радиуса R_{Ca} , к s – d переносу заряда, т.е. предпереходный Ca становится подобным d -элементу. Кроме того, по нашим оценкам, при сжатии соотношение электроотрицательностей компонент изменяется таким образом, что вероятность стабилизации соединений Ca с Fe и Co повышается. Отметим также, что моделирование в системе разновеликих твердых сфер показало [10], что в широком интервале отношений радиусов R_A/r_B наиболее устойчивы именно топологически плотноупакованные фазы Лавеса, причем их стабилизация происходит за счет конфигурационной энтропии.

Работа поддержана Российским научным фондом (грант 22-22-00806).

- [1] F.Stein, A.Leineweber, J. Mater. Sci. **56**, 5321 (2021).
- [2] А.В.Цвященко и др., Письма в ЖЭТФ **68**, 864 (1998).
- [3] C. Ritter. J. Phys.: Condens. Matter **1**, 2765 (1989).
- [4] A.V.Tsvyashchenko et al., Solid State Phenom. **190**, 225 (2012).
- [5] P.Blaha, K.Schwarz, F.Tran et al., J. Chem. Phys. **152**, 074101 (2020).
- [6] А.В.Боков, М.В.Магницкая, Д.А.Саламатин и др., ЖЭТФ **163**, 350 (2023).
- [7] A.V.Tsvyashchenko et al., Phys. Met. Metallogr. **93**, S59 (2002).
- [8] A.R.Oganov, C.W.Glass, J. Chem. Phys. **124**, 244704 (2006).
- [9] G.Kresse, J.Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
- [10] A.-P.Hynninen, L.Filion, M.Dijkstra, J. Chem. Phys. **131**, 064902 (2009).

Вычисление методом Монте-Карло компонент неподвижной точки ренормгруппового преобразования неупорядоченной модели Изинга

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

Теория фазовых переходов второго рода характеризуется аномально большими взаимодействиями флуктуаций параметра порядка и является теорией без малого параметра[1]. Поэтому ряды теории возмущений являются расходящимися и адекватно описать критические свойства реальных систем возможно только с применением специальных методов суммирования[2]. Ренормализационные константы связи определяют неподвижную точку ренормгруппового преобразования и определяют критические характеристики системы и критические индексы[3]. Вычисление таких критических характеристик непertурбативным методом Монте-Карло представляет большой интерес.

Проведено моделирование методом Монте-Карло термодинамического поведения неупорядоченной трехмерной модели Изинга с линейными размерами 32-140 и спиновой концентрацией $p=0,95$ вблизи критической температуры. Используя метод перевешивания были вычислены ренормализационные константы связи. При фиксированном отношении корреляционной длины к линейному размеру решетки была получена зависимость ренормализационной константы связи от температуры, что дало возможность получить значения величин при критической температуре. Полученные значения $g=37,72(3)$ и $u=10,19(24)$ хорошо согласуются с теоретико-полевыми результатами[3].

- [1] А.З.Паташинский, В.А.Покровский, Флуктуационная теория фазовых переходов, Наука, Москва (1982).
- [2] И.М.Суслов, ЖЭТФ. **127**, 1350 (2004)
- [3] M.V. Kompaniets, A. Kudlis, A.I. Sokolov, Phys. Rev.E **103**, 022134 (2021).

Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на решетке кагоме

Ризванова Т.Р.¹, Рамазанов М.К.^{1,2}, Магомедов М.А.^{1,2}, Муртазаев А.К.^{1,2}

¹Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН,
Махачкала, Россия

²Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия
E-mail: rizv@yandex.ru

Уникальные свойства низкоразмерных, квазиодномерных и двумерных структур и их использование в наносистемах выглядят многообещающе: это может позволить совершить значительный прорыв во многих научных, технологических областях в обозримом будущем. Поэтому закономерно, что изучению этих структур сейчас уделяется большое внимание. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q=4$ может быть применена для описания ряда материалов, в которых наблюдаются необычные температурные зависимости различных термодинамических параметров. Кроме того, интерес к этой модели обусловлен тем, что она может быть использована для описания реальных материалов и соединений. Данная модель интересна и тем, что значение $q=4$ является граничным значением интервала $2 \leq q \leq 4$, где наблюдается ФП второго рода и области значений $q>4$, в котором ФП происходит как переход первого рода [1].

Результаты исследований двумерной ферромагнитной модели Поттса с конкурирующими обменными взаимодействиями на треугольной [2], гексагональной [3,4] решетках и на решетке кагоме [5] методом Монте-Карло (МК) показывают, что характер ФП и термодинамическое поведение этой модели зависят от типа решетки. Это связано с тем, что степень вырождения основного состояния системы и точка фрустрации зависят от типа решетки.

Исследование двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на решетке кагоме с учетом обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей в литературе практически не встречается. Данная модель, даже без учета взаимодействий вторых ближайших соседей, вследствие особой геометрии является фрустрированной. Учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в данной модели может привести к изменению вырождению основного состояния, появлению различных фаз и ФП, а также влиять на его термодинамические и магнитные свойства.

В связи с этим, в данной работе нами предпринята попытка на основе метода МК провести исследование ФП и термодинамических свойств двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на решетке кагоме с взаимодействием первых и вторых ближайших соседей. Поскольку поведение модели Поттса зависит от величины J_2 ,

особый интерес представляет изучение природы ФП для этой модели при различных соотношениях величины антиферромагнитного взаимодействия вторых ближайших соседей. Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности изменения термодинамического поведения фрустрированной модели Поттса на решетке кагоме с числом состояний спина $q=4$ и эти вопросы до сих пор остаются открытыми.

Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 H &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k = \\
 &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \text{Cos } \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \text{Cos } \theta_{i,k}
 \end{aligned}$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных антиферромагнитных взаимодействий ($J_1 < 0$, $J_2 < 0$) соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$. Величина взаимодействия вторых ближайших соседей менялась в интервале $-1.0 \leq J_2 \leq 0.0$.

Схематическое представление этой модели представлено на рисунке 1.

Данное исследование выполнено с использованием алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло. Используя гистограммный метод проведен анализ природы фазовых переходов. Установлено, что в интервале $-1.0 \leq J_2 \leq -0.1$ наблюдается фазовый переход второго рода. Показано, что для значения $J_2 = 0.0$ в системе наблюдаются сильные фрустрации, которые приводят к исчезновению фазового перехода.

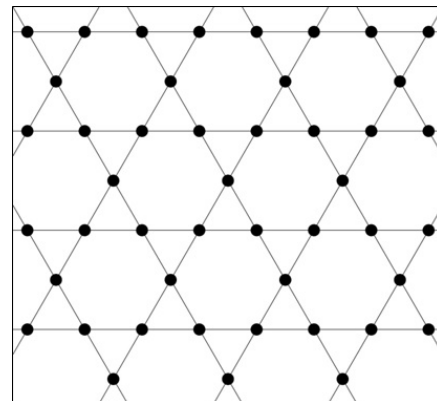


Рис. 1

- [1] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [2] А.К. Муртазаев, Д.Р. Курбанова, М.К. Рамазанов. ФТТ **61**, 2195 (2019).
- [3] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
- [4] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФТТ **62**, 442 (2020).
- [5] М.К. Ramazanov, А.К. Murtazaev, М.А. Magomedov, Т.Р. Rizvanova, А.А. Murtazaeva. Low Temp. Phys. **47**, 396 (2021).

Исследование критического поведения трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке методом Монте-Карло

Бабаев А.Б.^{1,2}, Муртазаев А.К.^{1,3}, Абуев Г.Я.¹, Ибаев Д.Г.¹, Бабаев М.А.³

¹ *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
e-mail: b_albert78@mail.ru

² *Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия*

³ *Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия*

В построении общей микроскопической теории фазовых переходов играют важную роль точные аналитические решения, которые получены для весьма ограниченного числа решеточных моделей. В 1925 году Изинг нашел решение для случая одномерной цепочки (в цепочке фазовый переход происходит при $T=0$) [1]. В 1944 году Онзагер получил аналитическое решение для двумерной модели Изинга в нулевом внешнем поле и доказал существование фазового перехода [2]. Точное аналитическое решение также было получено для двумерной модели Изинга на треугольной и гексагональной решетках в работе [3] и на решетке кагоме [4].

Следует отметить, что теоретические исследования показывают, что в двумерных моделях Поттса фазовый переход будет первого рода (со скрытой теплотой перехода), когда $q>4$, и непрерывным (без скрытой теплоты) при $q\leq 4$. Результаты теоретических исследований [5, 6] ничего не говорят о том, каковы критические показатели при $q\leq 4$. Это связано с тем, что теоретические подходы при рассмотрении модели Поттса сталкиваются с большими и труднопреодолимыми проблемами. Двумерная модель Поттса с $q=3$ и $q=4$ до настоящего времени не решена точно. Изучение магнитных и тепловых свойств этих моделей на различных двумерных решетках имеет важное фундаментальное и прикладное значение. В частности, многие объекты и явления, наблюдаемые в физике конденсированных сред, в частности, интеркаляция атомов щелочных металлов в решетку графита, а также адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита описываются низкоразмерными моделями Поттса на гексагональной решетке [6, 7], и их исследование к настоящему времени является своевременным.

В рассматриваемой работе исследуется критическое поведение трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке. При этом основной задачей является выяснение наличия логарифмических поправок для выражений, вытекающих из теории конечно-размерного скейлинга (КРС).

При построении трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке необходимо иметь в виду следующие особенности: 1) в узлах решетки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в 3-х

симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве размерности $q-1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (см. рис.1); 2) энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) и равна J , если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно в каких именно).

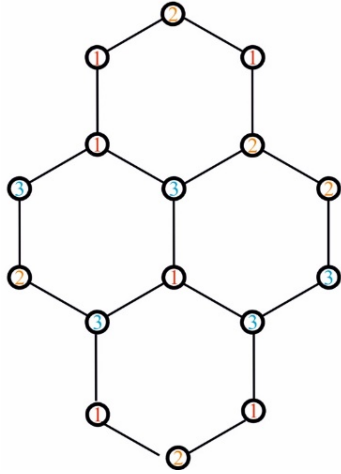


Рис.1. Трехкомпонентная стандартная модель Поттса на гексагональной решетке.

С применением кластерного алгоритма Вольфа [8] реализовался марковский процесс, для систем с периодическими граничными условиями. Рассматривались системы с линейными размерами $L=20 \div 320$ и числом узлов $N=2 \times L \times L/3$. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывали. В каждой цепи усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 200\tau_0$. Для самой большой системы $L=320$, $\tau_0 = 1.8 \times 10^3$ МК шагов/спин.

В работе [9] было показано, что в рассматриваемой модели Поттса наблюдается ФП второго рода в соответствии с аналитической теорией. Для выяснения наличия логарифмических поправок для выражений теории КРС рассчитывались статические критические индексы намагниченности β , восприимчивости γ , теплоемкости α и критический индекс ν для радиуса корреляции при $T=T_c$ с применением следующих выражений [10, 11]

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (2)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (3)$$

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n} \quad (4)$$

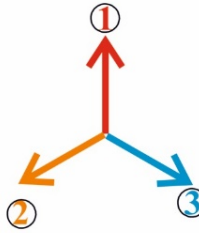
Эти соотношения были нами использованы для определения $\beta/\nu, \gamma/\nu$ и $1/\nu$. Аналогичное выражение для теплоемкости не описывает наблюдаемые на практике результаты, что было продемонстрировано в работе [11]. Для

С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть, представлен в виде [7]

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \delta(S_i, S_j), \quad S_i = P_1, P_2, P_3 \quad (1)$$

где J параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей (в дальнейшем считаем $J=1$ и работаем с безразмерной температурой); P_i – обозначение состояний узла с номером i .

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$$



аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L как правило используются другие выражения, например, [11, 12]

$$C = A + BL^{\alpha/\nu}, \quad (5)$$

где A, B — некоторые коэффициенты.

Для расчета критических индексов β, γ, α , и ν строились зависимости m, χ, C , и V_n от L . Анализ данных, выполненный с использованием

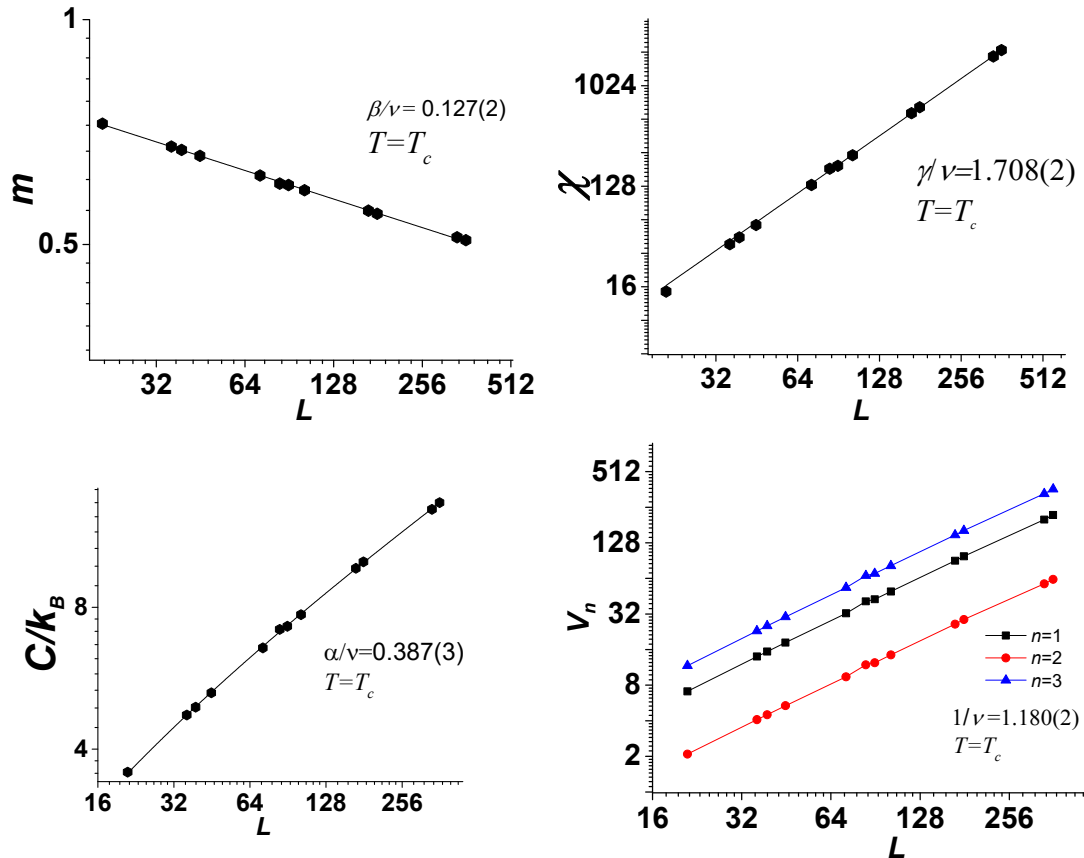


Рис.2. Зависимость намагниченности m , восприимчивости χ , теплоемкости C , для трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке от линейных размеров системы L при $T = T_c$.

Таблица 1. Критические индексы двумерной трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке

Метод	ν	$1/\nu$	α	α/ν	γ	γ/ν	β	β/ν	$\frac{\alpha+2\beta}{\gamma=2}$
Теория, [6]	5/6 0.83	6/5 1.20	1/3 0.333	2/5 0.40	13/9 1.444	26/15 1.733	1/9 0.111	2/15 0.133	2.0
МК, гексагональная решетка (наши данные)	0.847(3)	1.180(2)	0.327(3)	0.387(3)	1.446(1)	1.708(3)	0.107(3)	0.127(3)	1.99
МК [13], квадратная решетка				0.46(8)		1.736(1)		0.131(1)	

нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения β/v , γ/v , α/v , и $1/v$ (см. Рис.2). Затем, используя значения v , полученное в рамках данного исследования, определялись все остальные индексы β , γ , и α (см. Табл. 1). Точность критических индексов согласно выражениям теории КРС (2) – (5) в большей степени зависит от правильности учета данных для разных линейных размеров L . В наших расчетах строго контролировались данные для всех рассмотренных систем и при их незначительном отклонении от аппроксимирующей прямой процедура фитирования проводилась заново с отсеканием данных для $L < L_{min}$. Такой отбор данных для разных L позволяет заметно уменьшить погрешность в значениях КИ, и заметно их приближает к известным теоретическим значениям для модели жестких гексагонов, находящейся в одном классе универсальности с исследуемой моделью Поттса (с $q=3$) [6] (см. Табл. 1). Отметим, что трехкомпонентная модель Поттса ни на одной решетке прямым способом до настоящего времени не решена точно.

Моделирование трехкомпонентной модели Поттса на двумерной (гексагональной) решетке свидетельствуют, что в ней наблюдается фазовый переход второго рода. При этом:

1. Критическое поведение не демонстрирует мультипликативные логарифмические поправки к намагниченности, восприимчивости и теплоемкости.

2. Конечномерный анализ полученных данных демонстрирует наличие фазового перехода второго рода с критическими показателями (см. Табл.1), соответствующими классу универсальности ранее детально исследованной модели Поттса с $q=3$ на квадратной решетке [13].

- [1] E. Ising, Physik Z. **Bd.31**, 253 (1925).
- [2] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [3] R.M.F. Houtappel, Physica **16**, 425 (1950).
- [4] K. Kanô, S. Naya, Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
- [5] F.Y. Wu, Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific, London (2009).
- [6] Р. Бэкстер, Точно решаемые модели в статистической механике, Мир, 1985. 486 с.
- [7] F.Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [8] U. Wolff, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
- [9] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, ФТТ, **64**, 7, 858 (2022)
- [10] D. Loison, Phys. Lett. A **257**, 83 1999.
- [11] S. Wiseman, E. Domany, Phys. Rev. E. **58**, 2938 (1998).
- [12] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau, Phys.Rev. B. **43**, 6087 (1991).
- [13] J.-K. Kim, D.P. Landau, Physica A **250**, 362 (1998).

Исследование термодинамических и полевых характеристик смешанных спиновых систем

Гасанов С.Ш.¹, Магомедов М.А.^{1,2}

¹ Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия

² Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: magomedov_ma@mail.ru

В природе встречается большое количество магнитных материалов, образованных двумя веществами, имеющими разные по величине спины. Наиболее простой из моделей, используемых для описания таких материалов, является модель Изинга со смешанным спином.

В данной работе нами приводятся результаты исследования методом Монте-Карло модели Изинга со смешанным спином на квадратной решетке. Гамильтониан такой системы может быть представлен в виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle \in B} S_i S_j + D \sum_{j \in B} S_j^2, \quad \sigma_i = \pm \frac{1}{2}, \quad S_i = 0, \pm 1, \quad (2)$$

где первая сумма учитывает обменное взаимодействие между первыми ближайшими соседями, вторая сумма – между вторыми ближайшими соседями в подрешетке В (т.е. учитывается обменное взаимодействие между спинами S с величиной 1), третья сумма – анизотропию. Дальнейшее усложнение модели заключается в добавлении взаимодействия между спинами σ (в данной работе такой обмен нами не учитывался).

Структура модели и обменные взаимодействия между спинами на решетке приведены на рисунке 1.

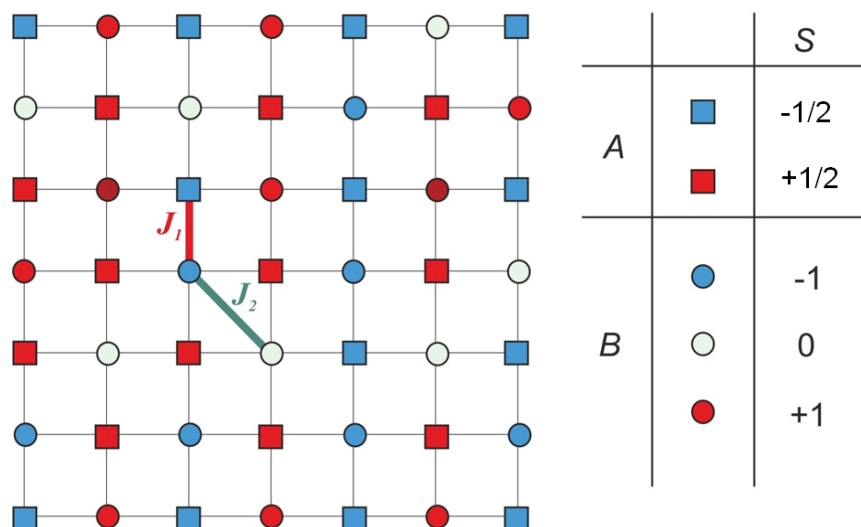


Рис. 1. Обменные взаимодействия между спинами S и σ , а также S и S .

Данная модель имеет весьма богатую фазовую диаграмму и описывает (при различных значениях J_1 , J_2 и D) большое количество квазидвумерных магнитных материалов на основе двух неэквивалентных элементов. Фазовая диаграмма модели приведена на рисунке 5.

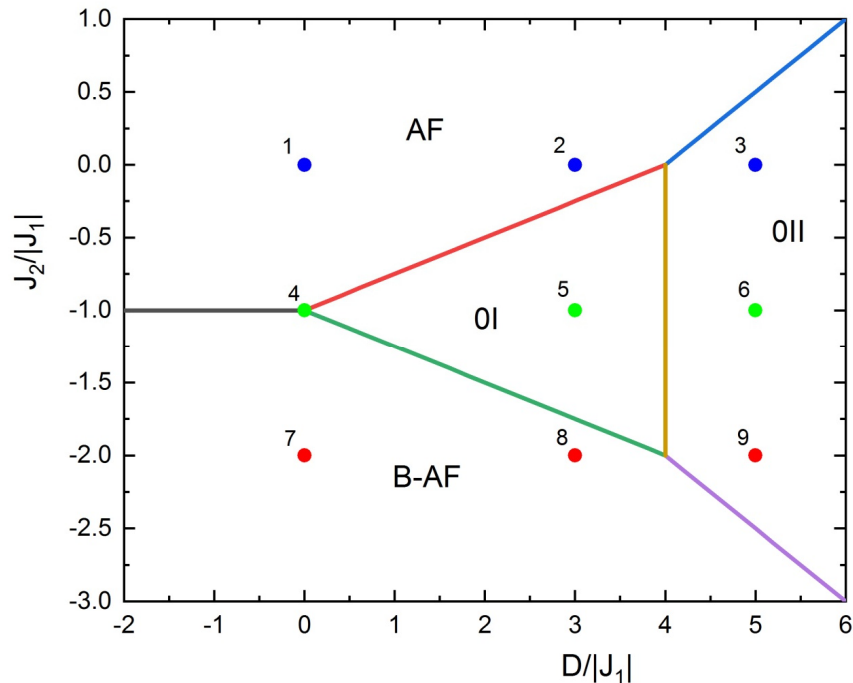


Рис. 2. Фазовая диаграмма модели.

Как видно из рисунка, в системе могут реализоваться 4 фазы:

1. AF;
2. B-AF;
3. 0I;
4. 0II.

Нами в данной работе проведены исследования для девяти случаев, отмеченных точками на рисунке 2:

1. $J_1 = -1$ $J_2 = 0$ $D = 0$ (AF);
2. $J_1 = -1$ $J_2 = 0$ $D = 3$ (AF);
3. $J_1 = -1$ $J_2 = 0$ $D = 5$ (0II);
4. $J_1 = -1$ $J_2 = -1$ $D = 0$ (AF, B-AF, 0I);
5. $J_1 = -1$ $J_2 = -1$ $D = 3$ (0I);
6. $J_1 = -1$ $J_2 = -1$ $D = 5$ (0II);
7. $J_1 = -1$ $J_2 = -2$ $D = 0$ (B-AF);
8. $J_1 = -1$ $J_2 = -2$ $D = 3$ (B-AF);
9. $J_1 = -1$ $J_2 = -2$ $D = 5$ (0II).

Для каждого отмеченного соотношения обменных параметров и анизотропии были рассчитаны плотности состояний и определены структуры основного состояния. На рисунке 3 приведены структуры основного состояния для каждой точки, приведенной на рисунке 2.

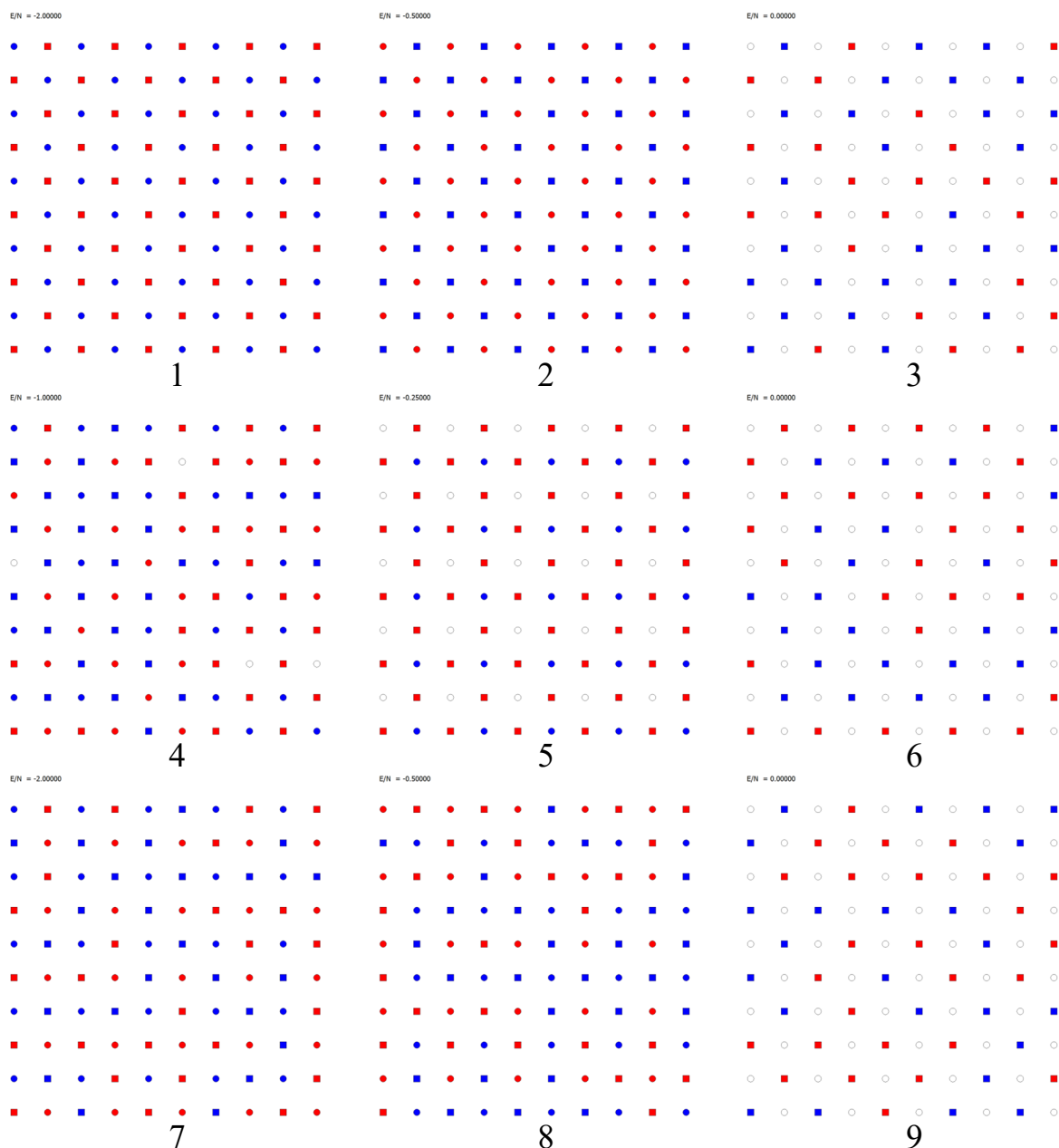


Рис. 3. Структуры основного состояния.

Таким образом, анализ плотности состояний и структур основного состояния при различных значениях обменных параметров J_1 и J_2 и анизотропии D показало, что основное состояние системы может быть невырожденным (модели 1, 2 и 5) или сильно вырожденным и неупорядоченным (остальные модели). Определены магнитные структуры основного состояния

Исследование выполнено в рамках научной программы НЦФМ (проект «Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях»).

Одномерная модель Изинга с конкуренцией обменных взаимодействий

Магомедов М.А.^{1,2}, Муртазаев А.К.^{1,2}, Магомедова Л.К.², Омарова А.А.²

¹ Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия

e-mail: magomedov_ma@mail.ru

В последние годы пристальное внимание уделяется исследованию различных низкоразмерных материалов (квази 1d и 2d). Интерес к таким материалам в основном связан с перспективой их применения в различных электронных устройствах. Чаще всего для исследования низкоразмерных материалов используется модель Изинга. Нами в данной работе проведены детальные исследования одномерной модель Изинга с учетом обменных взаимодействий между первыми, вторыми и третьими соседями. Для исследования применен современный высокоэффективный алгоритм Ванга-Ландау, который позволяет рассчитать плотность состояний, определить структуру основного состояния, степень ее вырождения и рассчитать температурные зависимости любых термодинамических параметров системы.

Гамильтониан исследованной нами системы может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} - J_3 \sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3}, \quad (1)$$

где первая сумма учитывает взаимодействие между первыми ближайшими соседями, вторая сумма – между следующими за ближайшими, третья сумма – между третьими соседями.

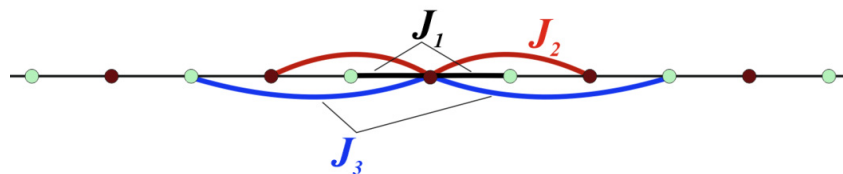


Рис. 1. Одномерная модель Изинга с учетом взаимодействия между ближайшими, вторыми и третьими соседями.

Схематически модель изображена на рисунке 1, где темными кружками условно обозначены спины, принимающие значение $S_i = +1$, а светлыми – спины $S_i = -1$. Нами проведены исследования при различных соотношениях обменных параметров J_1 , J_2 и J_3 . В данной работе приводятся результаты исследований при $J_1 = 1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$.

Исследования проводились на основе алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло [1]. Данный алгоритм является реализацией метода

энтропийного моделирования и его отличительной особенностью является возможность прямого вычисления плотности состояний системы, зная которую можно легко вычислить любые интересующие нас термодинамические параметры системы. Алгоритм Ванга-Ландау является разновидностью энтропийного моделирования и, как показывает опыт его применения в последние годы, является весьма эффективным для исследования различных дискретных спиновых систем [1]. Мировой опыт последних лет показывает, что алгоритм Ванга-Ландау показывает высокую вычислительную эффективность для систем с относительно малым числом частиц и дискретным распределением энергии. Оба условия выполняются для объекта наших исследований, вследствие чего нами и был выбран именно этот алгоритм.

Алгоритм Ванга-Ландау основан на том, что совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний $g(E)$, мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подобрать вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, можно получить изначально неизвестную плотность состояний $g(E)$, зная которую можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре. Так как плотность состояний $g(E)$ очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел пользуются величиной $\ln g(E)$. Важным обстоятельством является то, что плотность состояний $g(E)$ не зависит от температуры, следовательно, рассчитав ее однократно, мы можем вычислить значения любых термодинамических параметров системы при любой ненулевой температуре. Более подробное описание алгоритма можно найти в [1].

На рисунке 2. приведены плотности состояний $g(E)$ для систем с различными линейными размерами. Так как плотность состояний может достигать огромных величин, для проведения расчетов используется его логарифм $\ln g(E)$.

На рисунке 3 приведены гистограммы распределения энергии по числу посещений во время процесса моделирования. Наилучший результат работы алгоритма достигается при получении плоской гистограммы, когда все энергетические уровни посещаются одинаково часто. Критерий ровности гистограммы задается изначально и в нашем случае составляло 10%. Отметим также, что количество состояний может различаться на многие порядки, тем не менее, алгоритм позволяет одинаково анализировать их. Например, количество конфигураций с энергией $E/N=0$ для систем с линейными размерами $L=120$ составляет примерно 10^{35} , в то время как для энергии основного состояния $E/N=-1.6666$ число таких конфигураций составляет всего лишь 8. Несмотря на такую колоссальную

разницу, основное состояние ($E/N=-1.6666$) во время моделирования было посещено 3.512×10^6 раз, в то время как состояние с энергией $E/N=0$ было посещено 3.553×10^6 раз.

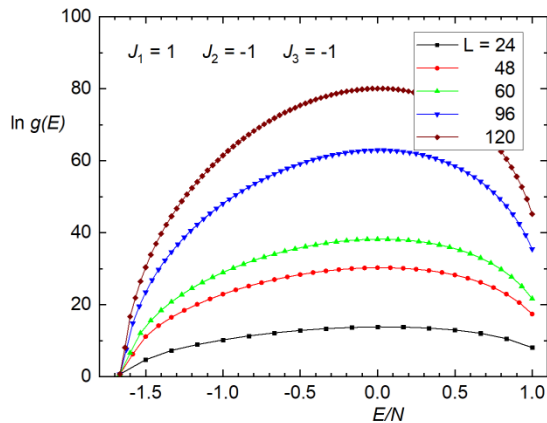


Рис. 2. Плотность состояний $g(E)$ для одномерной модели Изинга различных линейных размеров.

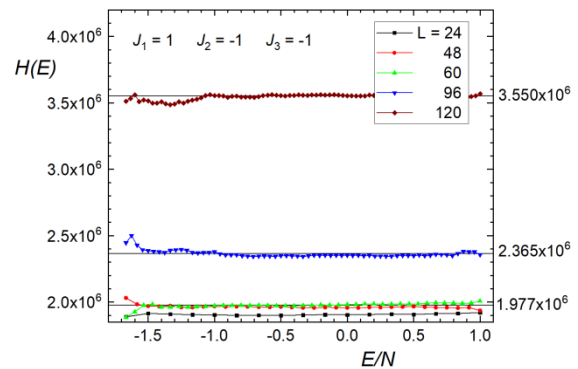


Рис. 3. Гистограммы распределения энергии по числу посещений.

Вычислив единожды плотность состояний системы $g(E)$ можно легко рассчитать температурную зависимость любой интересующей нас термодинамической величины. Рассчитанные таким образом температурные зависимости внутренней энергии E и энтропии S приведены на рисунках 4 и 5 соответственно.

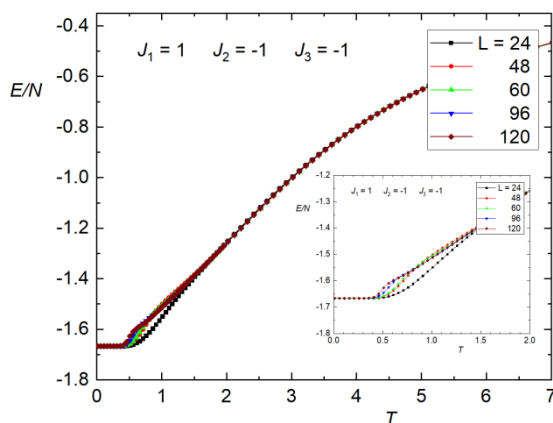


Рис. 4. Зависимость внутренней энергии E от температуры.

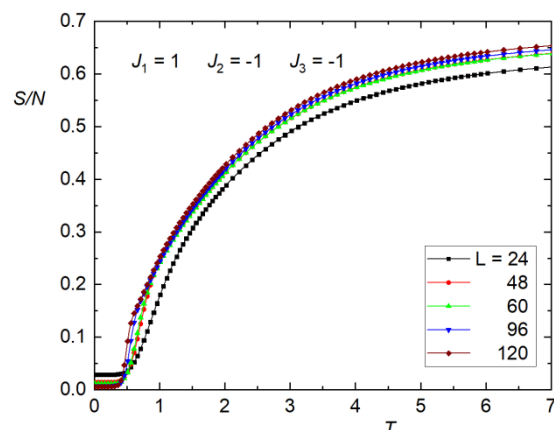


Рис. 5. Зависимость энтропии S от температуры.

Исследование выполнено в рамках научной программы НЦФМ (проект «Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях»).

- [1] Landau D.P., Tsai Shan-Ho, Exler M. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling // Am. J. Phys. – 2004. – Vol. 72., No. 10 – P.1294-1302.

Особенности магнитной анизотропии и спиновой переориентации в слабых ферримагнетиках $RFe_{1-x}Cr_xO_3$

Васинович Е.В., Москвин А.С.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

e-mail: e.vasinovich@gmail.com

Термин «слабый ферримагнетизм» был предложен в 1977 г. [1] для описания специфического магнитного упорядочения в замещенных слабых ферромагнетиках с конкурирующими знаками вектора Дзялошинского в парах Fe-Fe, Cr-Cr и Fe-Cr. Магнитные свойства слабых ферримагнетиков типа $RFe_{1-x}Cr_xO_3$, $Fe_{1-x}Cr_xVO_3$, $Mn_{1-x}Ni_xCO_3$ активно исследовались в 80-е годы прошлого века как экспериментально, так и теоретически [2]. Рост интереса к этим материалам в последнее десятилетие связан с их уникальными свойствами, в частности, наблюдением точек температурной и концентрационной компенсации магнитного момента, спиновой переориентации, эффекта перестраиваемого обменного смещения (exchange bias) [3] и перспективами их практического применения в магнитной памяти, магнитокалорике, термомагнитных переключателях и других multifunctional устройствах.

Нами рассмотрены основные механизмы формирования магнитной анизотропии и спин-переориентационных эффектов в слабых ферримагнетиках типа $YFe_{1-x}Cr_xO_3$. Дан детальный анализ механизмов анизотропии – антисимметричного обмена Дзялошинского-Мория, одно- и двухионной симметричной анизотропии в родительских составах $RFeO_3$ и $RCrO_3$ с немагнитным R-ионом La, Y, Lu. Модельные расчеты температурных и концентрационных зависимостей намагниченности и энергии конфигураций $\Gamma_4(G_x)$, $\Gamma_2(G_z)$ и $\Gamma_1(G_y)$ для слабоферримагнитных замещенных составов проведены в рамках обобщенной теории молекулярного поля.

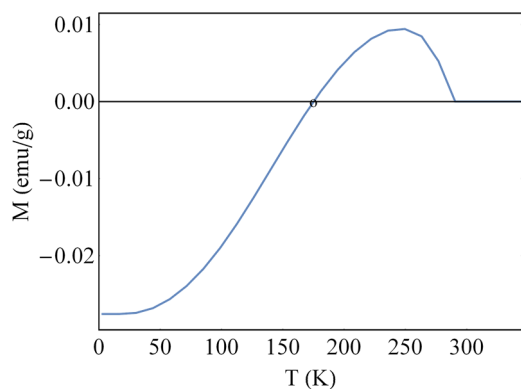


Рис.1 Модельная температурная зависимость намагниченности для $YFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$ с точкой компенсации $T_{comp}=175$ K.

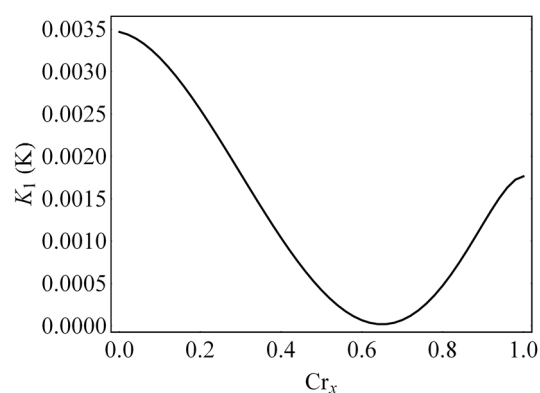


Рис.2 Концентрационная зависимость эффективной константы анизотропии в ac-плоскости слабого ферримагнетика $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ ($T=0$).

На рисунках приведены некоторые результаты расчетов, иллюстрирующие необычные магнитные свойства слабых ферримагнетиков на примере $YFe_{1-x}Cr_xO_3$. На Рис.1 приведена модельная температурная зависимость намагниченности для $YFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$ с точкой компенсации $T_{comp}=175$ К. Нами показана необычная концентрационная зависимость вклада конкурирующего антисимметричного обмена в магнитную анизотропию с резким уменьшением вклада в эффективную константу анизотропии в ac -плоскости в области промежуточных концентраций (Рис. 2), что может являться основной причиной «неожиданного» появления спиновой переориентации в слабых ферримагнетиках $RFe_{1-x}Cr_xO_3$ с немагнитным R-ионом La, Y, Lu [2,3], тогда как это явление типично для родительских ортоферритов и ортохромитов только с магнитными редкоземельными ионами. На Рис.3 представлены варианты модельного расчета температурной зависимости ориентации вектора намагниченности в ac -плоскости слабого ферримагнетика $YFe_{1-x}Cr_xO_3$, наглядно иллюстрирующие явление спонтанной спиновой переориентации.

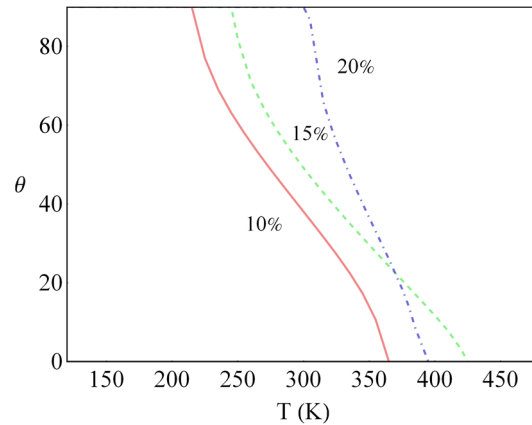


Рис.3 Ориентация вектора намагниченности в слабом ферримагнетике $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ при $x=10\%$, 15% , 20% .

Работа выполнена в рамках проекта РФФ № 22-22-00682.

- [1] А.М.Кадомцева, А.С.Москвин, И.Г.Бострем, Б.М.Ванклин, Н.А.Хафизова, ЖЭТФ **72**, 2286 (1977).
- [2] А.С.Москвин, ЖЭТФ **159**, 607 (2021).
- [3] I.Fita, V.Markovich, A.S.Moskvin *et al.*, Phys. Rev. B **97**, 104416 (2018).

Фазовая диаграмма трехвершинной модели Поттса на объемно-центрированной кубической решетке

Курбанова Д.Р., Магомедов М.А., Рамазанов М.К., Муртазаев А.К.

Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: d_kurbanova1990@mail.ru

Модель Поттса с q -состоянием имеет ряд интересных свойств для изучения [1-3]. Порядок фазового перехода модели Поттса зависит от пространственной размерности и числа состояний q . Фазовые переходы в антиферромагнитных моделях Поттса более сложны, чем в ферромагнитных моделях Поттса, поскольку сильно зависят от микроструктуры решетки.

Отдельный интерес представляет то, что в антиферромагнитной модели Поттса плотность энтропии основного состояния остается ненулевой без фрустрации. Ненулевая энтропия основного состояния $S_0 \neq 0$, является важным предметом статистической механики. Одним из физических примеров является спиновое стекло. Стекла Поттса обычно используются для описания большого класса анизотропных ориентационных стекол. Например, если кристалл молекулярного азота разупорядочен за счет включения некоторого процента аргона, то полученное соединение $\text{Ar}_{1-x}(\text{N}_2)_x$ представляет собой неупорядоченное квадрупольное стекло. Стекло Поттса является одной из предпочтительных моделей для описания материалов этого типа.

В настоящей работе на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау 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:

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

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 $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 8 \div 64$.

Используя метод разности плотности состояний $\ln g(E + \Delta E) - \ln g(E)$ и гистограммный метод проведен анализ порядка фазовых переходов. Построена фазовая диаграмма. На рис. 1 приведена энергия основного состояния, соответствующая разным областям фазовой диаграммы. Установлено, что в исследуемой модели при взаимодействии ближайших соседей наблюдается фазовый переход второго рода. Учет взаимодействия

вторых ближайших соседей в интервале $-0.7 \leq J_2 \leq -1.0$ приводит к фазовому переходу первого рода.

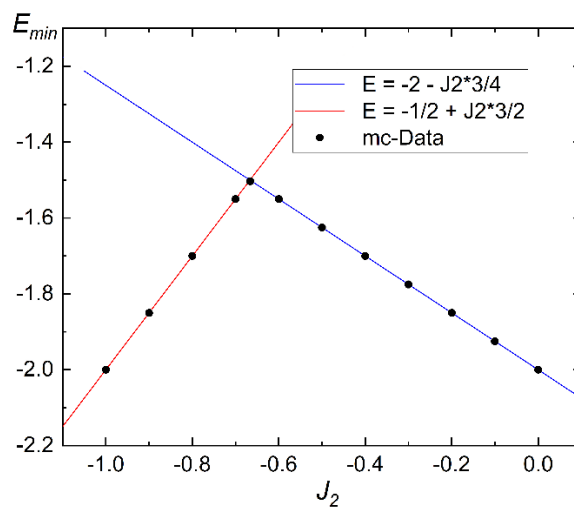


Рис 1 Фазовая диаграмма энергии основного состояния системы

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (№ 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)
- [3] S. Yamaguchi, Y. Okabe, J. Phys. A **34**, 8781 (2001)

Секция Б2

Общие вопросы физики
фазовых переходов и
критических явлений

Переход жидкость-стекло как топологический фазовый переход

Васин М.Г.

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

Микроскопические механизмы, которые порождают стекольное состояние вещества, до сих пор остаются предметом активных обсуждений. 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]). Было предположено, что переход в стекольное состояние является топологическим фазовым переходом [4].

В представленном докладе предлагается развитие этого подхода [5,6]. Показано, что в трёхмерной системе топологических дефектов может происходить фазовый переход, описание которого сводится к простой модели с эффективным гамильтонианом

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

где T^* – температура Фогеля-Фулчера, \mathbf{A} – эффективное (калибровочное) поле, описывающее взаимодействие между топологическими дефектами \mathbf{J} , а наблюдаемые величины связаны с корреляционной функцией $\langle\mathbf{J}\mathbf{J}\rangle^2\sim\exp\langle\mathbf{A}\mathbf{A}\rangle$. 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 $T \rightarrow T^{*+}$ описывается уравнением Фогеля-Фулчера-Таммана, а температура стекольного перехода, $T_g > T^*$, зависит от скорости охлаждения [5,6]. Но, пожалуй, наиболее важным результатом является то, что в статическом пределе данная модель демонстрирует большинство свойств, характерных для стекольного перехода: при $T \rightarrow T^{*+}$ теплоёмкость системы быстро

падает, а восприимчивость резко возрастает на конечную величину. При этом нелинейные восприимчивости третьего, χ_3 , и пятого, χ_5 , порядка при $T \rightarrow T^{*+}$ расходятся, причём $\chi_5 \sim \chi_3^2$, что согласуется с недавно полученными экспериментальными данными [1].

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ (№23-22-00168).

- [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** (4), 311 (1985).
- [4] И.Е.Дзялошинский, С.П.Обухов, *ЖЭТФ* **83** (2), 813 (1982).
- [4] M.G.Vasin, V.M. Vinokur, *Physica A* **525**, 1161 (2019).
- [6] M.G.Vasin, *Phys. Rev. E* **106**, 044124 (2022).

Локальная структура и затвердевание высокотемпературных стеклообразующих расплавов $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$, $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ под высоким давлением (до 10 ГПа)

Меньшикова С.Г.¹, Щелкачев Н.М.², Бражкин В.В.²

¹ ФГБУН УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

e-mail: svetlmensh@mail.ru

² ИФВД РАН, Москва, Троицк, Россия

e-mail: n.chelkatchev@gmail.com, brazhkin@hppi.troitsk.ru

Прогресс в понимании процессов, протекающих в высокотемпературных стеклообразующих расплавах типа Al-ПМ-РЗМ (ПМ-переходный металл, РЗМ-редкоземельный металл) в широком температурном диапазоне, а также в изучении влияния высоких давлений и скоростей охлаждения на их затвердевание имеет высокую научную значимость. Отработка методик получения сплавов в подобных экстремальных условиях является сложной технологической задачей. В условиях высоких давлений и температур при высокоскоростном затвердевании расплава отмечаются физические и химические процессы, протекание которых в обычных условиях затруднительно, в ряде случаев невозможно из-за термодинамических ограничений. В результате могут быть получены материалы с уникальными структурами и свойствами. Быстрое развитие компьютерных технологий делает возможным проведение теоретических исследований реалистичных систем с использованием различных методов, в частности, в рамках подхода *ab initio* (AIMD). В последнее время в изучении физики конденсированных сред все большее распространение получают методы расчетов *ab initio*, основанные на методе функционала плотности, что представляет высокий интерес и для изучения сплавов вышеуказанной системы.

Цель работы - исследование возможности формирования новых фаз в сплавах $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$ и $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ при быстром затвердевании их расплавов под высоким давлением, а также исследование структурных особенностей расплавов при малом и высоком давлениях.

Эксперимент. Образцы для исследований получали под высоким давлением в камере типа «тороид». Нагрев и плавление образца проводили пропусканием через него переменного тока. Схема эксперимента: установление давления → импульсный нагрев → выдержка при установленных давлении и температуре → охлаждение без сброса давления до комнатной температуры → уменьшение высокого давления до атмосферного. Скорость охлаждения расплавов 1000 град/с. Методом рентгеноструктурного анализа определяли фазовый состав образцов. Для исследования элементного состава, морфологии и размера структурных составляющих сплавов использовали методы электронной микроскопии.

Методами микроиндентирования выполняли измерения физико-механических свойств на комплексной системе измерений Nanotest 600.

Исследование образцов сплавов, полученных в зависимости от высокого давления (до 10 ГПа) и температуры (до 1800 К) показало, при давлении выше 5 ГПа в сплаве $Al_{86}Ni_2Co_6Gd_6$ формируются новые фазы: $(Al_3Gd)^*$ (по типу Al_3U), со структурой примитивного куба (сP4/2) и $(Al_8(Co/Ni)_4(Gd))^*$ (по типу Al_8Cr_4Gd) с тетрагональной структурой (tI26/1) [1]. В сплаве $Al_{86}Ni_6Co_4Gd_2Tb_2$ - такие же по составу фазы, Gd и Tb взаимозаменяются, однако морфология обнаруженных в сплавах фаз различается. Все образцы однородные, плотные. Структура мелкокристаллическая с высокими механическими свойствами.

Моделирование. Структурные исследования расплавов выполняли методом функционала плотности на основе VASP (The Vienna Ab initio Simulation Package). Рассматривали элементарные ячейки из 512 атомов с периодическими граничными условиями, в Гамма - точке. Энергия отсечки базиса плоских волн 500 эВ. Ввиду малых концентраций Ni, Co, Gd и Tb моделирование производили с использованием 10 независимых реплик расплавов с разным начальным случайным расположением атомов. Случайные начальные конфигурации создавали на основе потенциала взаимодействия твердых сфер между атомами и классического (LAMMPS) молекулярно-динамического моделирования. Далее наиболее неупорядоченные конфигурации отбирали алгоритмом УСПЕХ. Равновесная конфигурация достигалась VASP моделированием системы в NPT ансамбле в течение не менее 10 пс с шагом 1 фс. Далее системы моделировали VASP в NVT ансамбле в термостате Nose-Hoover при высоких температурах и давлениях. Для исследования жидкости при глубоком переохлаждении построили потенциал взаимодействия машинного обучения (MLIP) с использованием квантовых данных молекулярной динамики в качестве обучающего набора данных. Использовали пакет DEERPMД в качестве ядра для сборки MLIP. DEERPMД предназначен для минимизации усилий, необходимых для построения основанной на глубоком обучении модели межатомной потенциальной энергии и силового поля, а также для выполнения классических вычислений молекулярной динамики (CMD). Выбрали дескрипторы «se_a» с отсечкой 7 Å для обработки данных обучения. В результате точность MLIP составила 0.02 эВ/Å для сил и 1 мэВ для энергии, по сравнению с первоначальным расчетом. Классическая молекулярная динамика с MLIP имеет точность, сравнимую с квантовой молекулярной динамикой. Наиболее важным является то, что CMD может иметь дело с достаточно большим количеством частиц и распространять их в течение 10 мкс периодов времени, а не 1-10 нс. Мы выбрали LAMMPS для CMD. Для CMD - моделирования расплавов была взята ячейка с 13824 атомами в периодических граничных условиях и шагом по времени 2 фс. Сплавы смоделировали при охлаждении с помощью

термостата Nose-Hoover NPT от температуры 2000 до 100 К для 10 миллионов шагов MD.

В результате моделирования расплавов при 1800 К и давлениях 0 и 10 ГПа получены и исследованы радиальные функции распределения. Отмечено увеличение пиков и их смещение, что свидетельствует об увеличении степени локального упорядочения в расплаве при высоком давлении. Высокое давление, в основном, влияет на локальное окружение алюминия и гадолиния в расплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$ и алюминия, гадолиния и тербия в расплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$. Для анализа ближнего порядка в расположении атомов был использован метод, известный как «polyhedral template matching» с отсечкой RMSD 0.2. Анализ молекулярной динамики траекторий с помощью этого подхода показал, при нулевом давлении в расплавах в небольшой концентрации (0.5%) присутствуют икосаэдры. При повышении давления до 10 ГПа их концентрация увеличивается не менее чем до 4%. В этом расчете концентрации икосаэдров учитывались только атомы, имеющие ближайшее окружение икосаэдра, т.е. в центре икосаэдра. При 10 ГПа атомы образуют перколяционный кластер, а при атмосферном давлении - нет. Для обоих давлений расчеты выполнены при 1800 К. Если при нулевом давлении охладить системы на 200 К, с 1800 К до 1600 К, после снижения давления с 10 до 0 ГПа концентрация икосаэдров уменьшается. Сеть икосаэдров в металлической жидкости обычно является признаком стеклообразующей способности расплава. Т.о. с увеличением давления увеличивается и стеклообразующая способность расплавов. Известно, что, как и при фазовых переходах второго рода, при стеклообразовании происходит резкое изменение теплоемкости и коэффициента термического расширения. В этом случае наблюдается излом на температурной зависимости объема. Мы выполнили оценку зависимости температуры стеклования от давления на основе температурной зависимости объема, приходящегося на один атом. С помощью атомистического компьютерного моделирования охлаждения расплавов из 5000 атомов, при использовании многочастичного нейросетевого потенциала взаимодействия MLIP была найдена температура стеклования (около 600 К при нормальном давлении и 820 К при давлении 10 ГПа для сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$ и около 650 К при нормальном давлении и 850 К при давлении 10 ГПа для сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$), составляет около 0.5 от их температуры плавления, что хорошо согласуется с литературными данными для аналогичных металлических систем.

Результаты эксперимента и моделирования обсуждаются.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 22-22-00674.

[1] S.G.Menshikova, N.M.Chtchelkatchev, V.V.Brazhkin, *Materialia* **28**, 101713 (2023).

Сегнетоэлектрические и антисегнетоэлектрические фазовые переходы в семействе трикальцийфосфата

Стефанович С.Ю., Кондаков И.В., Латипов Е.В.,
Титков В.В., Дейнеко Д.В.

*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
e-mail s_stefanovich@mail.ru*

Трикальций фосфат $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ (ТКФ) [1] и его структурные аналоги используют как важный компонент современных биосовместимых материалов остеопатической хирургии [2]. Лучшей биосовместимости сложных фосфатов кальция может способствовать наличие у них дипольно-упорядоченных состояний, широко представленных в биологических объектах [3].

Существование сегнетоэлектрических фазовых переходов (СЭ ФП) при высоких температурах ($T_c > 1000$ К) в структурном типе ТКФ ранее было установлено для ванадатных соединений $\text{Ca}_{9-x}\text{Me}_x\text{R}(\text{VO}_4)_7$, где Me – двухвалентный, а R – трехвалентный катион, преимущественно РЗЭ [4]. Позже, у некоторых их фосфатных аналогов были установлены фазовые превращения как СЭ, так и антисегнетоэлектрического (АСЭ) типа [5,6], однако их связь с атомным строением фосфатов семейства ТКФ еще не раскрыта. При несомненной полярности кристаллического строения родоначальника семейства $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ (пр.гр. $R\bar{3}c$), все еще недостаточно данных о существовании сложно-замещенных веществ на его основе, положении и характере протекающих в них фазовых превращений. В настоящем исследовании вопрос об условиях различных видов дипольного упорядочения рассмотрен для широкой группы фосфатов семейства ТКФ, в которых кальций частично замещен на одно-, двух и трехвалентные катионы. Часть из этих катионов (лития, магния, цинка и др.) известны как потребительные антисептические и биологически активные добавки, другие использованы как структурообразующие элементы.

Ряды однофазных составов $0 \leq x \leq 1$ получены в системах $\text{Ca}_{10.5-1.5x}\text{R}_x(\text{PO}_4)$ ($\text{R} = \text{PЗЭ}$), $\text{Ca}_{10.5-x}\text{Me}_x(\text{PO}_4)_7$ ($\text{Me} = \text{Zn}, \text{Mg}, \text{Cd}$), $\text{Ca}_8\text{MeR}(\text{PO}_4)_7$ и $\text{Ca}_9\text{Li}_{1/2}\text{R}_{5/6}(\text{PO}_4)_7$ твердофазным методом в виде порошков и керамики, и их принадлежность к структурному типу ТКФ установлена путем рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа. Классификация веществ ТКФ согласно их центрo- (цс, пр.гр. $R\bar{3}c$) и нецентросимметричному (нцс, пр.гр. $R3c$) строению проводили методом генерации второй оптической гармоники (ГВГ). Метод ГВГ использовали также для обнаружения переходов между состояниями нцс \leftrightarrow цс при температурах до 1200 К. Наличие ФП контролировали термографически, а его СЭ или АСЭ- природу устанавливали по температурной аномалии

диэлектрической проницаемости, идентичной или близкой закону Кюри-Вейсса.

Установлено, что замещение кальция в ТКФ на одно-, двух и трехвалентные катионы возможно в исследованных составах до значений $x = 1$. При этом, по данным ДТА и диэлектрической спектроскопии (рис. 1) СЭ фазовый переход, имеющий в β - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ точку Кюри $T_c = 1203$ К, сохраняется и при катионном замещении. В случае отдельного введения либо двух-, либо трехвалентных катионов сегнетоэлектрическая точка Кюри трикальцийфосфата смещается в сторону низких температур. На Рис. 2 представлена аномалия $\varepsilon(T)$ для близкого ТКФ состава $\text{Ca}_{10}\text{Yb}_{0.33}(\text{PO}_4)_7$. Повышение содержания иттербия в образцах $\text{Ca}_{10.5-1.5x}\text{Yb}_x(\text{PO}_4)_7$, $0 \leq x \leq 1$ приводит к снижению температуры СЭ фазового перехода до 800 К.

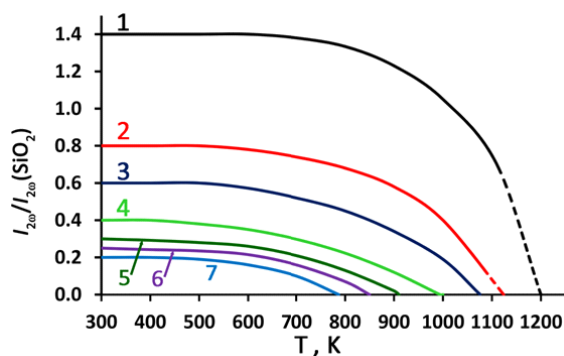


Рис.1. Температурная зависимость сигнала ГВГ для $\text{Ca}_{10.5-1.5x}\text{Yb}_x(\text{PO}_4)_7$, $x = 0$ (1), 0.17 (2), 0.33 (3), 0.5 (4), 0.67 (5), 0.83 (6), 1.0 (7).

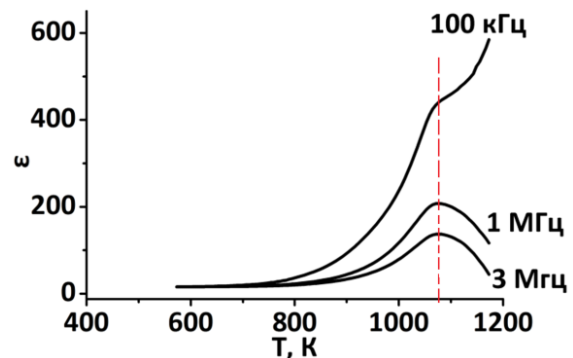


Рис.2. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости $\text{Ca}_{10}\text{Yb}_{0.333}(\text{PO}_4)_7$.

Одновременное введение двух- и трехвалентных катионов в кристаллическую структуру ТКФ стабилизируют цс-состояния, что приводит к исчезновению эффекта ГВГ. Наличие ФП для этих составов фиксируется по данным термического анализа с пониженными температурами ФП в области 770–870 К. Превращениям между двумя цс-фазами отвечает показанная на рис. 3 аномалия $\varepsilon(T)$, которая, однако, не сопровождается обычным для СЭ-перехода максимумом тангенса угла диэлектрических потерь, который связан с наличием доменной структуры. Тем самым, температурная аномалия диэлектрической проницаемости в отсутствие СЭ доменов указывают на АСЭ превращение.

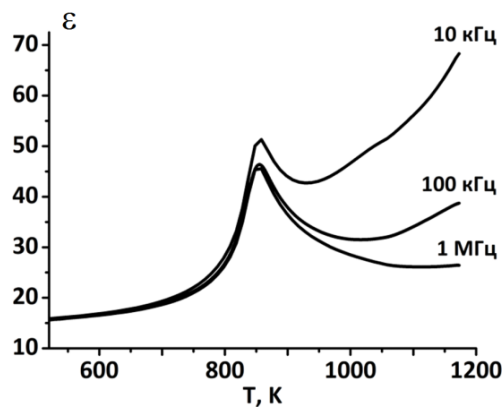


Рис.3. Диэлектрическая проницаемость $Ca_8MgEu(PO_4)_7$.

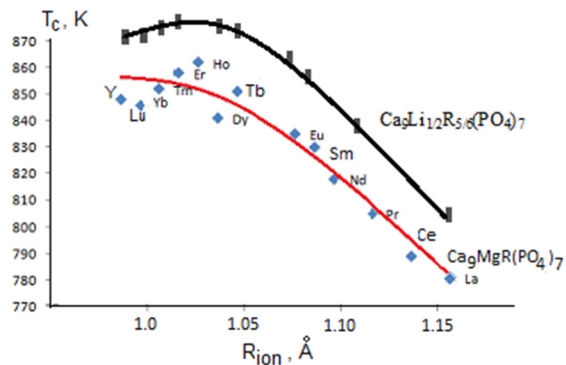


Рис.4. Температуры СЭ ФП в $Ca_9Li_{1/2}R_{5/6}(PO_4)_7$ и АСЭ ФП в $Ca_8MgR(PO_4)_7$.

Расширение семейства ТКФ за счет введения в структуру одновалентных катионов (Li, Na, K) формирует ряд структур с максимальным заполнением вакантных катионных позиций. Возникающие при этом сложнзамещенные структуры $Ca_9Li_{1/2}R_{5/6}(PO_4)_7$ имеют сегнетоэлектрические ФП при $T_c = 800-900$ К (рис. 4). Тем самым, росту температур СЭ ФП в семействе ТКФ способствует заполнение одновалентными катионами всех доступных для них структурных позиций. Напротив, АСЭ переходы в этом структурном типе реализуются при недостатке катионов по сравнению с числом структурных позиций, происходят при пониженной температуре, а в отдельных случаях сопровождаются снижением симметрии структуры до моноклинной. Все соединения $Ca_8MgR(PO_4)_7$ ($R = La, Pr-Lu$ и Y) являются centrosymmetric и претерпевают ФП из АСЭ цс-фазы $R\bar{3}c$ в параэлектрическую фазу $R\bar{3}m$ в интервале температур от 705 до 862 К. Температура ФП возрастает с увеличением радиуса иона R^{3+} от Lu^{3+} до Tb^{3+} ; с дальнейшим увеличением радиуса R^{3+} температура ФП уменьшается.

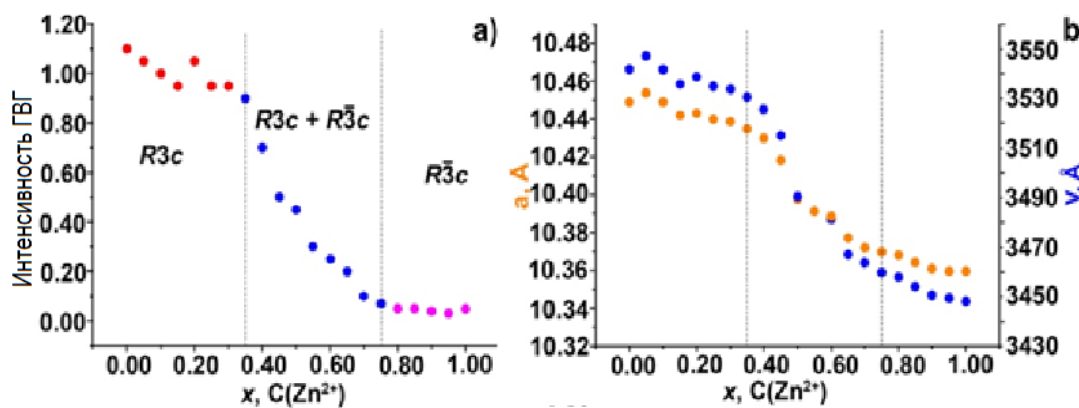


Рис.5. Зависимость интенсивности эффекта ГВГ (а) и параметра a и объема V элементарной ячейки (б) от концентрации Zn^{2+} для $Ca_{9-x}Zn_xGd(PO_4)_7$.

Методом ГВГ установлены концентрационные интервалы существования центрo- и нецентросимметричной фаз в системе $\text{Ca}_{9-x}\text{Zn}_x\text{Gd}(\text{PO}_4)_7$ (Рис. 5). Наличие эффекта ГВГ определяет область существования нцс-фазы $R3c$ при $x < 0.35$, обладающей СЭ-свойствами, а отсутствие эффекта ГВГ при $x > 0.75$ соответствует цс-фазе $R\bar{3}c$ с ФП АСЭ-типа на рис. 5а. На рис.5б АСЭ типу дипольного упорядочения отвечает уменьшенный объем элементарной ячейки. Такое соотношение структурных параметров для СЭ и АСЭ фаз в семействе ТКФ имеет общий характер и отражает механизм возникновения дипольного упорядочения в зависимости от расстояния между диполями. Показательным, в этом отношении, является ряд стехиометрических соединений $\text{Ca}_8\text{CdR}(\text{PO}_4)_7$, которые по мере продвижения по ряду $R = \text{PЗЭ}$ в соответствии с известным эффектом «редкоземельного сжатия» демонстрируют уменьшение размера элементарной ячейки. Обладающие эффектом ГВГ нцс-соединения в начале ряда $\text{Ca}_8\text{CdR}(\text{PO}_4)_7$ с $R = \text{La} - \text{Nd}$ имеют СЭ ФП, подобный показанному на рис. 3. Продвижение по ряду РЗЭ, начиная с $R = \text{Sm}$, приводит к исчезновению эффекта ГВГ, что указывает на появление у этих соединений центра симметрии. Соединения с $R = \text{Sm} - \text{Er}$ имеют фазовые переходы АСЭ-типа при характерном для них отсутствии максимума на температурной зависимости тангенса угла диэлектрических потерь.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 23-23-00270.

- [1] B. Dickens, L.W. Schroeder, W.E. Brown. J. Solid State Chem. 10 (1974) 232–248.
- [2] Xia Li, Atsuo Ito, Yu Sogo, Xiupeng Wang, R.Z. LeGeros. Acta Biomaterialia 5 (2009) 508–517
- [3] G. Ciofani, A. Menciassi (Eds.): Piezoelectric Nanomaterials for Biomedical Applications. Springer-Verlag. Berlin-Heidelberg, 2012.
- [4] Лазорьяк Б.И., Белик А.А., Стефанович С.Ю., Морозов В.А., Малахо А.П., Барышникова О.В., Леонидов И.А., Леонидова О.И. Докл. РАН, 384 (2002), 780 - 784.
- [5] B.I. Lazoryak, V.A. Morozov, A.A. Belik, S.Y. Stefanovich, *et. al.* Solid State Sci. 6 (2004) 185–195.
- [6] S.Yu.Stefanovich, A.A.Belik, M.Azuma, M.Takano, O.V.Baryshnikova, V.A.Morozov, B.I.Lazoryak, O.I.Lebedev, G.VanTendeloo. Phys.Rev.B. V.70 (2004), n.172103.

Двухфазная иерархическая модель критического и сверхкритического поведения флюида

Баталин О.Ю., Вафина Н.Г.

Институт проблем нефти и газа РАН, Москва

e-mail: obatalin@ipng.ru

Введение. Вдали от критической точки жидкость характеризуется высокой степенью пространственной однородности, что дает возможность получать уравнения состояния высокой точности. Вблизи критической точки структура флюида становится иерархически самоподобной на всех уровнях пространственного масштаба, поведение описывается с использованием теории ренормгруппы. Разработано несколько подходов для интеграции результатов теории ренормгруппы и законов классического поведения, но ни один из них не учитывает молекулярную структуру флюида.

В последнее десятилетие обнаружены довольно неожиданные явления в сверхкритической области. Как известно, жидкость непрерывно преобразуется в газ при прохождении вокруг критической точки. Однако, при пересечении линии Видома, которая является продолжением в сверхкритическую область кривой сосуществования жидкость-газ, наблюдаются явления, напоминающие фазовый переход. При переходе линии Видома свойства флюида резко изменяются [1-3]. Имеется аналогия с докритическим кипением, называемая псевдокипением [4,5]. В этой зоне молекулы флюида могут быть классифицированы как жидко-подобные либо газо-подобные [6,7]. Отмечают, что линия Видома разделяет сверхкритическую область на две части с различными динамическими режимами, жидко-подобным и газо-подобным [8].

Целью работы является создание модели, которая описывает флюид во всех ее проявлениях. То есть, модель должна представляет все три состояния, фундаментально различающихся друг от друга: однородное состояние в области далекой от критической точки, состояние близкое к критической точке и сверхкритическое состояние. Для правильного представления структуры жидкости в критической области модель должна быть иерархической. Она также должна объяснить особенности сверхкритического состояния, наблюдаемые при переходе через линию Видома. Авторы разработали двухфазную иерархическую модель (Two-Phase Hierarchical Model, кратко - ТРНМ), удовлетворяющую указанным требованиям. Это решетчатая модель, в которой флюид состоит из блоков жидко-подобного и газо-подобного типов. Каждый крупный блок включает определенное количество более мелких блоков, и так далее на всех уровнях масштаба.

Основы модели. В простой решеточной модели объем системы разделяется на ячейки. Каждая ячейка либо заполнена частицей, либо пуста. Предполагается, что взаимодействовать могут только частицы, расположенные в соседних ячейках.

В квазихимическом приближении, которое учитывает только корреляции в ближайшем размещении частиц, критическая температура T_q равна $T_q = (w/c) \ln((c - 2)/c)$, где c – координационное число, w – энергия взаимодействия. Для простой кубической решетки приведенная критическая температура ($T^* = kT/w$) есть $T_q^* = 2.4663$. На рис. 1 штрихами показана кривая сосуществования квазихимического приближения. В квазихимическом приближении (соответствует теории среднего поля) сосуществующие фазы считаются пространственно однородными. Однако при приближении к критической точке флуктуации растут, что подрывает предположение об однородности фаз и приводит к трансформации кривой сосуществования жидкость-газ. Кривая сосуществования, построенная с учетом флуктуации (“точное решение”), на рис. 1 представлена сплошной линией. Можно видеть, что реальная критическая температура смещается в сторону более низких температур, $T_c^* = 2.2486$. Относительно “точного” решения, критическая температура квазихимического приближения выше на 9.7%.

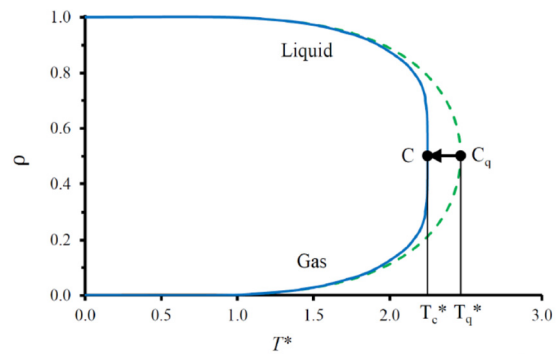


Рис. 1. Плотности сосуществующих фаз

Сдвиг критической температуры в сторону низких температур имеет следующее объяснение. Рассмотрим жидкость и газ в теории среднего поля. При приближении температуры к критической точке жидкая и газовая фазы становятся очень похожими. Соответственно, поверхностное натяжение стремится к нулю. По этой причине дополнительная поверхность не ведет к существенному увеличению общей энергии системы. Жидкость и газ приобретают способность смешиваться друг с другом. В газовой фазе появляются локальные образования жидкости — “капли”, а в жидкой фазе — “пузыри” газа (см. рис. 2). Смешение фаз значительно увеличивает количество пространственных конфигураций системы, то есть энтропию. В некоторой области ниже критической температуры смешение фаз становится термодинамически выгодным. Образуется стабильная смесь “капель” жидкости и “пузырей” газа. Эти пузыри и капли находятся не только рядом друг с другом, но также могут вкладываться друг в друга. Внутри капли может находиться некоторое число пузырей меньшего размера, внутри пузыря — несколько меньших капель. Кроме того, внутри этих маленьких капель находятся еще более мелкие пузыри, внутри маленьких пузырей — более мелкие капли, и так далее (на рис. 2 цифрой обозначен номер уровня). В результате, в некоторой термодинамической области ниже критической температуры, рассчитанной по теории среднего поля, образуется иерархическая система вложенных капель и пузырей. Истинная критическая температура рассматриваемой системы сдвигается к низким температурам.

Модель. Для количественного описания, капли и пузыри представляются в виде кубов. Кубы разбиваются по размеру на классы, называемые уровнями. Предполагается, что кубы уровня $n + 1$ в определенное количество раз больше, чем кубы уровня n . На каждом уровне кубы разбиваются на два типа: жидко-подобные и газо-подобные. В жидко-подобном кубе уровня $n + 1$ доля жидко-подобных кубов уровня n больше, чем доля газо-подобных кубов уровня n ; в газо-подобных кубах уровня $n + 1$ ситуация обратная. Кубы первого уровня состоят из частиц и вакансий. Кубы второго уровня состоят из жидко-подобных и газо-подобных кубов первого уровня. Более высокие уровни кубов формируются аналогично. В результате получается система жидко-подобных и газо-подобных кубов, иерархически вложенных друг в друга. Представленную модель мы назвали двухфазной иерархической моделью. Рассматриваемый метод моделирования флюида отличается от метода ренормгруппы тем, что основывается на непосредственном рассмотрении молекулярной структуры флюида, тогда как ренормгрупповой подход исходит из групповых свойств. Получены следующие результаты.



Рис. 2. Вид иерархической структуры флюида

Глобальная трансформация структуры флюида. Изначально однородный сверхкритический флюид при понижении температуры и давления в какой-то момент разлагается на “микро-капли” и “микро-пузырьки” первого уровня, образуя двухфазоподобное состояние (сверхкритическая мезофаза), которое представляет собой продолжение фазового перехода жидкость-газ в сверхкритическую область. Отличие состоит в том, что здесь разделение происходит на микроуровне. При дальнейшем понижении температуры и давления в некоторый момент возникают жидко-подобные и газо-подобные объекты второго уровня, сформированные из микро-пузырьков и микро-капель первого уровня. Затем последовательно появляются объекты следующих уровней, образованные из жидко-подобных и газо-подобных объектов предыдущего уровня. При определенной температуре (критическая температура всей рассматриваемой системы) максимальный размер микрообъектов устремляется к бесконечности, что соответствует образованию бесконечной непрерывной фазы. В результате усложнения пространственной организации в критической области флюид можно описать как ансамбль различных объектов жидко-подобного и газо-подобного типов специфической иерархической структуры. Ниже критической температуры наблюдается жидкая и газовая фазы в обычном понимании. При дальнейшем понижении температуры микрообъекты различных размеров постепенно исчезают, жидкая и газовая фазы становятся полностью однородными.

Сверхкритическая мезофаза - первый этап сепарации сверхкритического флюида, где разделение осуществляется на микрокапли и микропузырьки минимального размера. Мезофаза имеет следующие свойства.

- Состоит из переплетенных жидко-подобных и газо-подобных микрообразований, сформированных из связанных в кластеры микрообъектов одного типа.

- При термодинамическом переходе через двухфазоподобную область (мезофазу) соотношение жидко-подобных и газо-подобных структур меняется, что объясняет явление псевдокипения. Так изначально, при повышенном давлении жидкость однородна (жидко-подобна). При понижении давления в некоторый момент появляются микропузырьки. Далее доля жидко-подобных структур уменьшается, а доля газо-подобных структур увеличивается. Наконец возникает полностью однородная газо-подобная фаза.
- В области мезофазы изотермы являются прямыми линиями. Объяснение заключается в том, что мезофаза представляет собой бинарную смесь практически идентичных жидко-подобных и газо-подобных квазичастиц. Смеси этого типа характеризуются прямолинейным видом изотерм. Заметим, что прямолинейные изотермы являются всего лишь приближением, критическая изотерма имеет классическую критическую точку.
- Границы мезофазы были оценены на основе данных из разных источников. Мезофаза распространяется на уровень 10% выше критической температуры, что составляет примерно 1,6 критического давления. При температуре близкой к критической граничные точки мезофазы оцениваются примерно в 75% и 125% от плотности в критической точке.

Заметим, что рассматриваемую здесь сверхкритическую мезофазу не следует путать с мезофазой Вудкока (Woodcock) [9,10], связываемую с перколяционными переходами. Они основаны на совершенно разных концепциях.

Преобразование классического уравнения состояния. Классические уравнения состояния выводятся в предположении однородности жидкой и газовой фаз. Двухфазная иерархическая модель структуры флюида приводит к смещению критической точки в сторону более низких температур, обеспечивая физически корректное описание поведения в критической области. Разработан метод преобразования классического уравнения состояния, применимый как для чистых жидкостей, так и для многокомпонентных смесей. Метод протестирован на уравнении состояния Смирновой-Викторова. Получены хорошие результаты для алканов, их бинарных и тройных смесей.

Заключение. Выявлена иерархическая структура флюидов, наиболее выраженная в околокритической и сверхкритической областях. Объяснена природа мезофазы - особого состояния сверхкритического флюида, где система представляется специфической смесью жидко-подобных и газо-подобных микрообъектов. Разработан универсальный метод трансформации классического уравнения состояния, корректирующий поведение флюида в околокритической области. Все это приводит к новым представлениям о пространственной структуре и свойствах флюидов, обеспечивая основы развития сверхкритических технологий.

- [1] F.Maxim et al., *Advanced Science*, **8**, 2002312 (2020).
- [2] Q.Wang et al., *Int. J. Heat Mass Transfer*, **181**, 121875 (2021).
- [3] Z. Wei et al., *Fuel*, **321**, 123938 (2022).
- [4] F.Maxim et al., *Nature Communications*, **10**, 4114 (2019).
- [5] D.T.Banutu, *Period. Polytech. Chem. Eng.*, **63**, 270-275 (2019)
- [6] M.Y.Ha et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, **9**, 1734-1738 (2018).
- [7] T.J.Yoon et al., *J. Chem. Phys.*, **150**, 154503 (2019).
- [8] G.G.Simeoni et al., *Nature Physics*, **6**, 503-507 (2010).
- [9] L.V.Woodcock, *Fluid Phase Equilibria*, **351**, 25-33 (2013).
- [10] L.V.Woodcock, *Int. J. Thermophys.*, **35**, 1770-1784 (2014).

Metal-insulator transition in organic quasi-two-dimensional metals κ -(ET)₂Hg(SCN)₂X (X=Cl, Br)

Zverev V.N.¹, Pesotskii S.I.², Lyubovskii R.B.², Shilov G.V.², Torunova E.I.², Zhilyaeva S.A.² and Canadell E.³

¹ *Institute of Solid State Physics, RAS, Chernogolovka, Moscow region, Russia*
e-mail: zverev@issp.ac.ru

² *FRC of Chemical Physics and Medicinal Chemistry, RAS, Chernogolovka, Moscow region, Russia*

³ *Institut de Ciència de Materials de Barcelona, ICMA-B-CSIC, Barcelona, Bellaterra, Spain*

The organic quasi-two-dimensional metals are strongly correlated systems in which electron correlations often lead to the Mott metal-insulator (M-I) transition. Due to their high sensitivity to external pressure one can easily suppress the MI-transition and recover the metallic state. Here we study the influence of external pressure on M-I transition in two organic quasi-two-dimensional metals κ -(ET)₂Hg(SCN)₂X, where X=Cl, Br, (hereafter κ -Hg-Cl and κ -Hg-Br), ET=bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene. The crystals are isostructural, i.e. have the same monoclinic structure at $T=300$ K and both of them have metallic-like temperature dependence of the resistance, but at $T_{M-I} \approx 30$ K for κ -Hg-Cl and at $T_{M-I} \approx 90$ K for κ -Hg-Br the M-I transition takes place. The application of comparatively small external pressure suppresses the Mott transition for both crystals.

Here we present the results of comparative studies of transport and magneto-transport properties for these two organic metals. We have found that despite the similarity of the structure and transport properties above T_{M-I} the transition scenario for these crystals is strictly different. Unlike to the crystal κ -Hg-Cl, where we have Mott-type transition in electronic system [1], the transition in κ -Hg-Br takes place with hysteresis, which indicates on the first order type of the transition (see Fig.1).

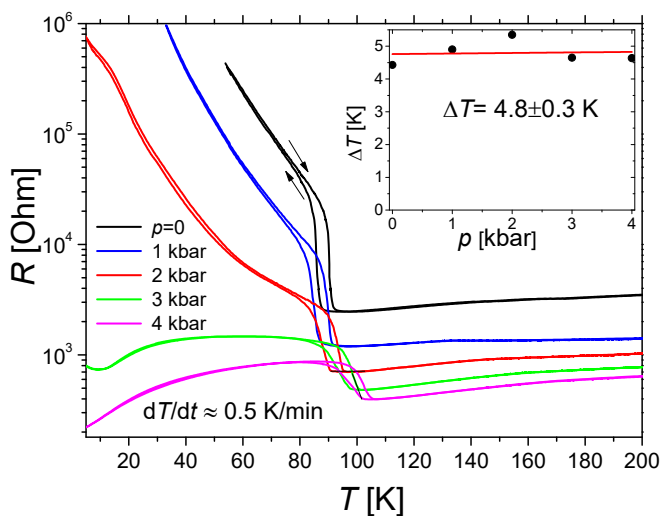


Fig.1. M-I transition in κ -(ET)₂Hg(SCN)₂Br at different pressures. The Insert demonstrates that the width of the hysteresis loop is pressure independent.

The observed Shubnikov-de Haas (SdH) quantum oscillations of the magnetoresistance in κ -Hg-Cl contain two frequencies $F_\alpha=600$ T, $F_\beta=4600$ T look typical for the κ -salts and correspond to the well known Fermi surface with α and β electron orbits [1]. Whereas in κ -Hg-Br the oscillations have only one frequency equals 236 T, which value is far from the reasonable one for the traditional Fermi surface of κ -salts (Fig.2). Our low temperature X-ray studies have shown that in this crystal the structure changes during the transition from monoclinic above T_{M-I} to triclinic below T_{M-I} . A theoretical study suggests that this phase transition should be of the metal-to-metal type and brings about a substantial change of the Fermi surface, but, as it follows from the experiment, the Mott transition is superimposed on the structural one. Apparently, the electronic system in the triclinic phase is unstable toward a Mott insulating state leading to the growth of the resistance when the temperature drops below $T_{M-I} \approx 90$ K.

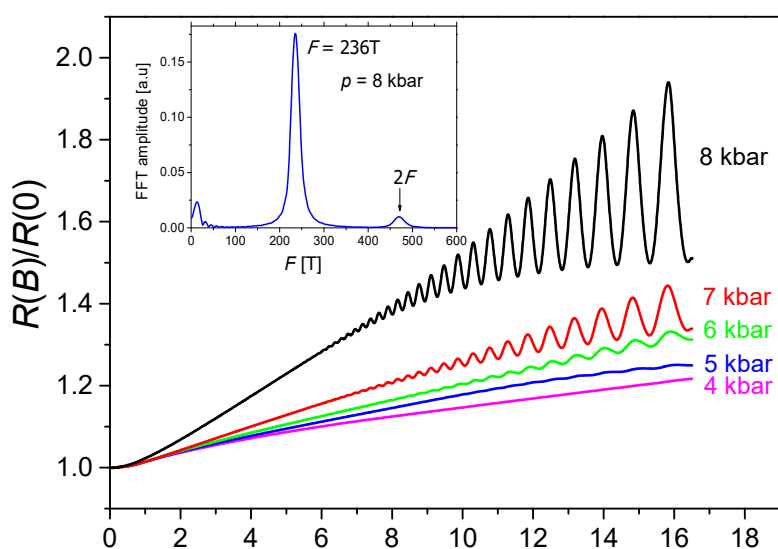


Fig.2. Shubnikov-de Haas oscillations in κ -(ET)₂Hg(SCN)₂Br at different pressures. $T=0.5$ K. Fourier spectrum of oscillations is shown in the Insert.

The observed quantum oscillations of the magnetoresistance are in good agreement with the calculated Fermi surface for the triclinic phase, thus providing a plausible explanation for the puzzling behavior of κ -Hg-Br as a function of temperature and pressure around 100 K, and for the difference in the SdH oscillations. The present study points out interesting differences in the structural and physical behavior of the two room temperature isostructural salts κ -(ET)₂Hg(SCN)₂X with X=Cl, Br.

The work in FRC of Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry was carried out within the State assignment number AAAA-A19-119092390079-8. V.N.Z. acknowledges support of Russian Foundation for Basic Research No. 21-52-12027.

- [1] R.B.Lyubovskii, S.I.Pesotskii, E.I. Zhilyaeva, A.M.Flakina, R.N.Lyubovskaya, V.N.Zverev, JETP, 133(1), 104-108 (2021)

Фазовые переходы в сложных кальций-натрий-медь фосфатах со структурой β - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$

Никифоров И.В.¹, Дейнеко Д.В.^{1,2}, Псиола Е.В.¹

¹ МГУ им. М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

e-mail: nikiforoviv@my.msu.ru

² Лаборатория Арктической минералогии и материаловедения ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты, Россия

e-mail: deynekomsu@gmail.ru

Вещества со структурой β - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ являются перспективными матрицами для реализации фотолюминесцентных свойств [1], проявляют сегнетоэлектрические и нелинейно оптические свойства [2]. Известен широкий ряд двойных фосфатов с общими формулами: $\text{Ca}_{10}\text{A}^+(\text{PO}_4)_7$, $\text{Ca}_{9.5}\text{M}^{2+}(\text{PO}_4)_7$, $\text{Ca}_9\text{R}^{3+}(\text{PO}_4)_7$ [3], характеризующиеся разнообразием свойств. Однако, общих кристаллохимических особенностей в формировании свойств ещё не сформулировано. Поэтому, интересным представляется изучить тройные фосфаты, с варьированием содержания катиона-заместителя в матрице, а также их влияние на фазообразование и фазовые переходы.

В рамках работы было синтезировано и изучено 8 образцов состава $\text{Ca}_{10-x}\text{NaCu}_x(\text{PO}_4)_7$ ($x = 0; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.6; 0.8; 1.0$). В качестве исходных веществ использовались CaCO_3 (99.9%), CaHPO_4 (99.9%), Na_2CO_3 (99.9%), CuO (99.9%). Количество каждого вещества было рассчитано из стехиометрических количеств на 1 грамм продукта. Вещества получали методом твердофазного синтеза посредством ступенчатого нагревания до 900°C в течение 70 часов. После завершения реакции были получены порошки бело-синего цвета.

На дифрактограммах не присутствует примесных пиков, относящихся к исходным веществам или побочным фазам (Рисунок 1). Это указывает на то, что все синтезируемые вещества имеют одинаковую структуру, так как рефлексы полностью совпадают с ранее известным

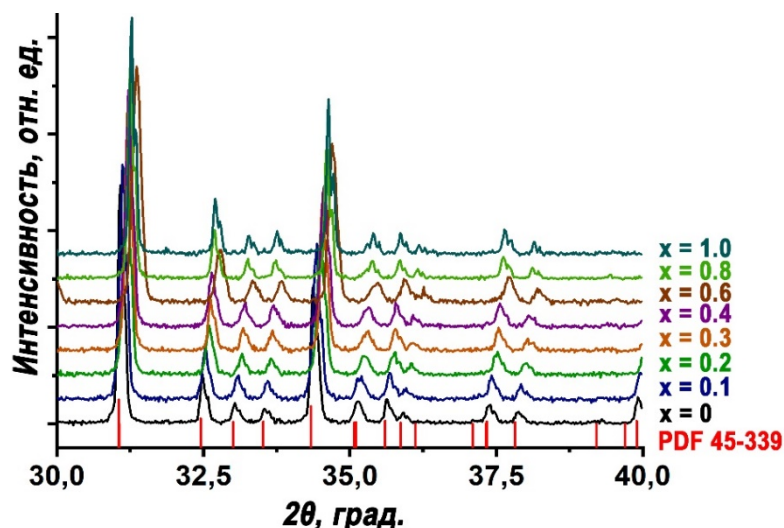


Рис. 1. Фрагмент дифрактограммы для $\text{Ca}_{10-x}\text{NaCu}_x(\text{PO}_4)_7$ ($x = 0; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.6; 0.8; 1.0$) и рефлексы для $\text{Ca}_{10}\text{Na}(\text{PO}_4)_7$ (PDF-2

$\text{Ca}_{10}\text{Na}(\text{PO}_4)_7$ (PDF-2 № 45-339). Таким образом, образуется непрерывная серия твердых растворов. Наблюдается смещение рефлексов в сторону больших углов, что связано с замещением катиона Ca^{2+} на катион меньшего ионного радиуса Cu^{2+} ($r_{\text{VI}}(\text{Cu}^{2+}) = 0.73 \text{ \AA}$; $r_{\text{VI}}(\text{Ca}^{2+}) = 1.00 \text{ \AA}$).

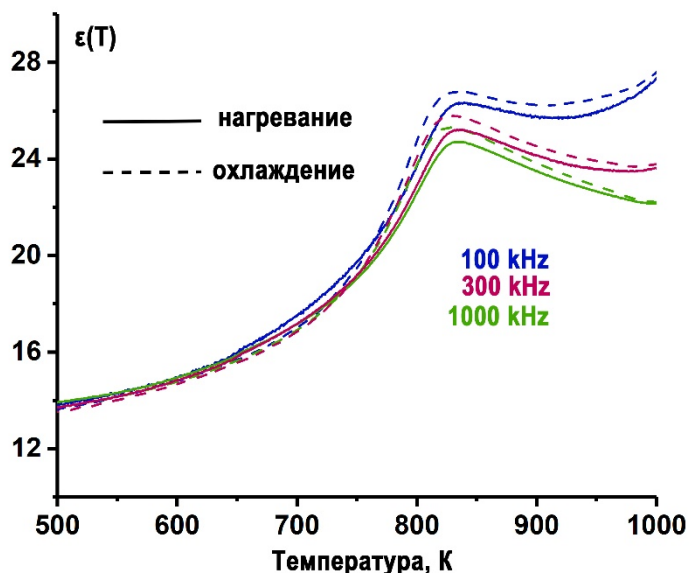


Рис. 2. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости для $\text{Ca}_{9.2}\text{NaCu}_{0.8}(\text{PO}_4)_7$.

На рисунке 2 показана температурная зависимость диэлектрической проницаемости от температуры при разных частотах для вещества $\text{Ca}_{9.2}\text{NaCu}_{0.8}(\text{PO}_4)_7$. Наличие λ -максимума, который не смещается в зависимости от приложенного напряжения, указывает на наличие фазового перехода при $\sim 800 \text{ K}$. Температурный гистерезис на зависимости указывает на тип фазового перехода, который можно отнести к I роду.

- [1] Belik A A, Morozov V A, Deyneko D V, Savon A E, Baryshnikova O V, Zhukovskaya E S, Dorbakov N G, Katsuya Y, Tanaka M, Stefanovich S Y, Hadermann J, Lazoryak B I., J. Alloys Compd. **699**, 928 (2017).
- [2] Teterskii A V, Morozov V A, Stefanovich S, Lazoryak B., Russ. J. Inorg. Chem. **50**, 986 (2005).
- [3] Morozov V A, Presnyakov I A, Belik A A, Khasanov S S, Lazoryak B I., Crystallography Reports, **42**, 758 (1997).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (проект № 23-73-10007).

Калорические эффекты в сегнетоэлектрике NH_4HSeO_4

Бондарев В.С.^{1,2}, Михалева Е.А.¹, Горев М.В.^{1,2},

Богданов Е.В.^{1,3}, Флеров И.Н.^{1,2}

¹ *Институт Физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН,*

660036 Красноярск, Россия

e-mail: vbondarev@yandex.ru

² *Институт инженерной физики и радиоэлектроники, Сибирский федеральный университет, 660074, Красноярск, Россия*

³ *Институт инженерных систем и энергетики, Красноярский государственный аграрный университет, 660049, Красноярск, Россия*

Калорические эффекты (КЭ), как физическое явление, были обнаружены в твердых телах достаточно давно и буквально до недавнего времени их исследованию уделялось незаслуженно мало внимания. Главная причина заключалась в незначительности обратимых изменений энтропии/температуры под воздействием внешнего поля (магнитного, электрического, механических напряжений, гидростатического давления) соответственно в изотермических/адиабатных условиях. Значительный рост интереса исследователей, материаловедов и инженеров к КЭ обусловлен в последнее десятилетие поиском новых функциональных материалов, перспективных для применения в альтернативных твердотельных охлаждающих устройствах.

Оказалось, что наиболее перспективными являются материалы, испытывающие фазовые переходы, в частности, ферроидной природы. Установлено, что основными параметрами, определяющими калорический отклик материала, являются изменения энтропии ΔS_0 и параметра порядка ΔX (поляризация- P , намагниченность- M , линейная- $\Delta(\Delta L/L)_0$ или объемная- $\Delta(\Delta V/V)_0$ деформация) и чувствительность температуры фазового перехода к внешнему полю dT_0/dY (электрическому - E , магнитному - H , механических напряжений - σ , гидростатическому давлению - p) [1, 2].

В настоящей работе в качестве объекта исследований КЭ был выбран монокристалл кислого селената аммония NH_4HSeO_4 . Данный тип кристалла является производным от недавно изученных нами сегнетоэлектриков $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ и NH_4HSO_4 , в которых были обнаружены достойные внимания величины барокалорического (БКЭ), пьезокалорического (ПКЭ) и электрокалорического эффектов (ЭКЭ) [3, 4], благодаря тому, что они испытывают фазовые переходы, связанные с упорядочением тетраэдрических анионных и катионных групп, и, как следствие, сопровождаются значительными изменениями энтропии.

Как известно, кристалл NH_4HSeO_4 является сегнетоэлектриком в температурной области $110 \div 250$ К, испытывающим последовательность из трех фазовых переходов при температурах 100К, 250К и 417К. При этом высокотемпературный фазовый переход является переходом в суперионное

состояние. Кроме того, в области 250-260К между сегнетоэлектрической и параэлектрической фазами, обнаружена несоразмерная фаза, характеризующаяся аномальным температурным поведением упругости и формы линий спектра ЯМР ^{77}Se , типичным для пространственно-модулированной структуры [5].

Необычным также является и направление спонтанной поляризации вдоль цепочек водородных связей и наличие подрешеток с нескомпенсированной и скомпенсированной поляризациями и антиполяризацией [6]. Сведений о КЭ в кислом селенате аммония до сих пор в научной литературе не сообщалось.

В связи с этим, в настоящей работе представлен комплексный анализ теплофизических свойств, а также ЭКЭ, БКЭ и ПКЭ в кристалле NH_4HSeO_4 . С этой целью были проведены экспериментальные исследования теплоемкости, в том числе под электрическим полем, энтропии, скрытой теплоты, линейного теплового расширения и барических коэффициентов. Анализ фазовых диаграмм $S - T$, $T - p$ и $T - \sigma$ позволил определить зависимости температуры и давления интенсивного и экстенсивного БКЭ ($\Delta T_{\text{AD}}(T, p)$, $\Delta S_{\text{ВСЕ}}(T, p)$) и ПКЭ ($\Delta T_{\text{AD}}(T, \sigma)$, $\Delta S_{\text{РСЕ}}(T, \sigma)$). Впервые выполнены прямые измерения интенсивного ЭКЭ в кислом селенате аммония. Анализ полевых зависимостей теплоемкости $C_p(T, E)$ и петель диэлектрического гистерезиса использовался для вычисления интенсивного и экстенсивного ЭКЭ путем расчета в рамках уравнений Максвелла и для получения сведений об интегральной электрокалорической эффективности NH_4HSeO_4 . Показано, что рассматриваемый кристалл является перспективным для применений в твердотельных охлаждающих устройствах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-10014, Красноярского краевого фонда науки, <https://rscf.ru/project/23-22-10014/>

- [1] M. Valant. *Progress in Materials Science* **57**, 980-1009, (2012).
- [2] L. Mañosa, A. Planes. *Advanced Materials* **29**, 1603607, (2017).
- [3] E. Mikhaleva, M. Gorev, V. Bondarev, E. Bogdanov, I. Flerov. Comparative analysis of piezocaloric and barocaloric effects in single-crystal and ceramic ferroelectric $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$. *Scripta Materialia*, **191**, 149-154, (2021).
- [4] V.S. Bondarev, E.A. Mikhaleva, M.V. Gorev, I.N. Flerov. *J. Alloys Compd.* **892**, 162130, (2021).
- [5] I.P. Aleksandrova, O.V. Rozanov, A.A. Sukhovsky, Y.N. Moskvich. Detection of the incommensurate modulation of the hydrogen bond double minimum potential in the phase of NH_4HSeO_4 . *Phys. Lett. A.*, V. **95**, No 6. - P. 339-342, (1983).
- [6] К.С. Александров, А.И. Круглик, С.В. Мисюль, В.А. Симонов. *Кристаллография*, т. **25**, с. 1142, (1980).

Барокалорическая эффективность комплексных фторидов $(\text{NH}_4)_3\text{MF}_7$ ($M = \text{Ti}, \text{Sn}$)

Богданов Е.В.^{1,2}, Горев М.В.^{1,3}, Флеров И.Н.^{1,3}

¹ Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН — обособленное подразделение ФИЦ КИЦ СО РАН, Красноярск, Россия

² Институт инженерных систем и энергетики, Красноярский государственный аграрный университет, Красноярск, Россия

³ Институт инженерной физики и радиоэлектроники, Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия
e-mail: evbogdanov@iph.krasn.ru

В настоящее время все возрастающее внимание научного и инженерного сообществ привлекают калорические эффекты (КЭ) в твердых телах, представляющие собой обратимые изменения энтропии или температуры под действием внешнего поля соответственно в изотермических и адиабатических условиях. В соответствии с природой внешнего поля и сопряженного параметра порядка различают электро (ЭКЭ)-, магнето (МКЭ)-, баро (гидростатическое давление, БКЭ)- и пьезо (одноосное напряжение, ПКЭ)-калорические эффекты [1].

В работе рассмотрены экстенсивные и интенсивные БКЭ-параметры и коэффициенты в зависимости от химического давления, влияющего на формирование структурного беспорядка и его изменения при фазовых переходах в комплексных фторидах $(\text{NH}_4)_3\text{M}^{4+}\text{F}_7 \equiv (\text{NH}_4)_2\text{M}^{4+}\text{F}_6 \cdot \text{NH}_4\text{F}$ (M^{4+} : Sn, Ti), содержащих октаэдрические анионные $[\text{MF}_6]$ и тетраэдрические катионные $[\text{NH}_4]$ группы.

Перовскитоподобная структура комплексных фторидов в исходной кубической фазе $R\bar{3}m$ ($Z = 1$) сильно разупорядочена. При охлаждении в них реализуются одиночные ($R\bar{3}m \leftrightarrow R\bar{3}$; $M^{4+} = \text{Sn}$) и последовательные ($R\bar{3}m \leftrightarrow R4/m\bar{3}m \leftrightarrow R4/m\bar{3} \leftrightarrow R\bar{3}$; $M^{4+} = \text{Ti}$) фазовые переходы типа порядок-беспорядок, близкие к трикритической точке, сопровождающиеся большим изменением энтропии [2, 3]. Исследования фазовых T - p диаграмм

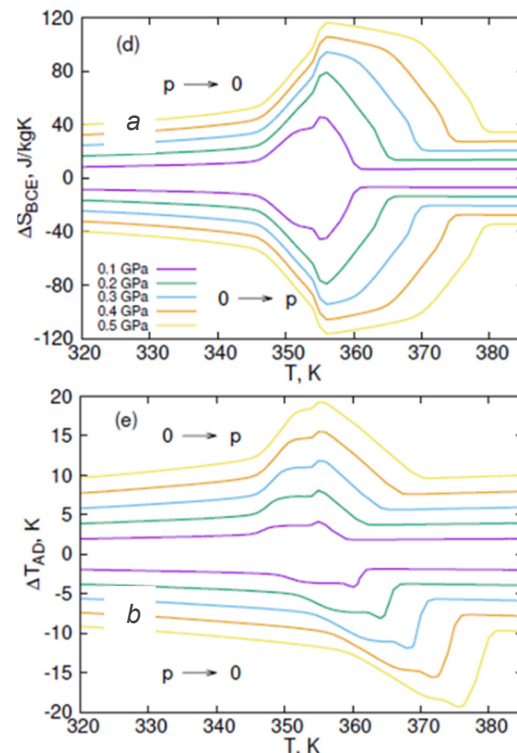


Рис. 1. Температурные зависимости экстенсивного (а) и интенсивного (б) БКЭ в $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$ (с учетом вклада кристаллической решетки) при приложении и снятии гидростатического давления.

показали, что прямой переход между двумя кубическими фазами возможен и в $(\text{NH}_4)_3\text{TiF}_7$ при давлении выше 0.4 ГПа.

Сведения об абсолютных, относительных и интегральных параметрах БКЭ получены путем анализа диаграмм энтропия – температура - давление. Установлено, что изменение теплового расширения кристаллической решетки под давлением приводит к дополнительному вкладу в полную энтропию твердых тел и в случае исследованных фторидов играет существенную роль в формировании БКЭ (рис. 1 и 2).

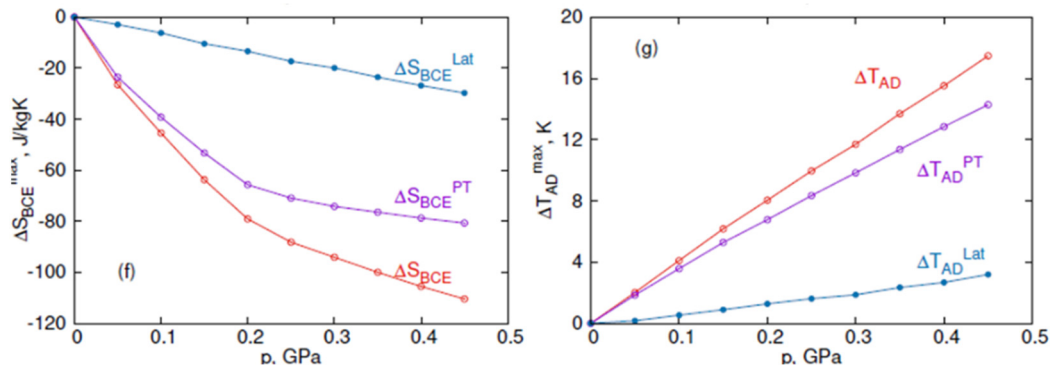


Рис. 2. Зависимости от давления максимальных значений экстенсивного ΔS_{BCE} (a) и интенсивного ΔT_{AD} (b) БКЭ в $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$. Величины ΔS_{BCE}^{PT} , ΔT_{AD}^{PT} и ΔS_{BCE}^{Lat} , ΔT_{AD}^{Lat} – вклады в БКЭ, связанные соответственно с параметром порядка и кристаллической решеткой.

Уступая в ряде случаев другим барокалорическим материалам по абсолютным величинам экстенсивного и интенсивного эффектов, комплексные фториды $(\text{NH}_4)_3M^{4+}F_7$ удовлетворяют широкому кругу других не менее важных требований, предъявляемых к перспективным твердотельным хладагентам [4].

Еще одна специфическая особенность комплексных фторидов связана со сложными фазовыми $T-p$ диаграммами, содержащими тройные точки при достаточно низких давлениях и фазовые границы с разными знаками барических коэффициентов dT/dp , что позволяет реализовать в одном материале как прямые, так и обратные БКЭ [5] в достаточно узких диапазонах давления и температуры (рис. 3).

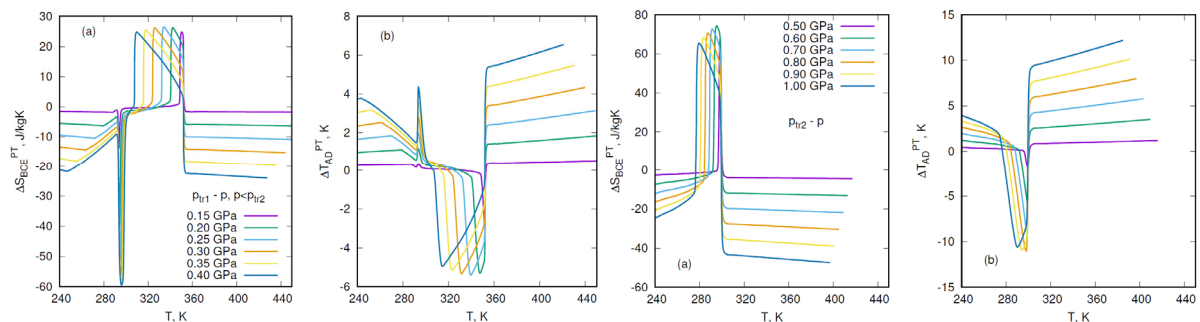


Рис. 3. Температурные зависимости экстенсивного и интенсивного БКЭ в $(\text{NH}_4)_3\text{TiF}_7$ при давлениях $p > p_{trp1}$ и $p > p_{trp2}$.

Замещение центрального атома $Ti^{4+}(R_{Ti} = 0.61 \text{ \AA}) \rightarrow Sn^{4+}(R_{Sn} = 0.69 \text{ \AA})$, вызывает изменение химического давления в структуре комплексных фторидов $(NH_4)_3M^{4+}F_7$, которое оказалось действенным инструментом для варьирования характеристик фазовых переходов (температура, гистерезис, энтропия, деформация, чувствительность к внешнему давлению и др.) и, как следствие, параметров барокалорической эффективности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00115, <https://rscf.ru/project/23-22-00115/>.

- [1] A. Greco, C. Aprea, A. Maiorino, C. Masselli, The environmental impact of a caloric heat pump working with solid-state materials based on TEWI analysis, *AIP Conference Proceedings* 2191 (1) (2019) 020091.
- [2] S.V. Mel'nikova, E.I. Pogoreltsev, I.N. Flerov, N.M. Laptash, Unusual sequence of phase transitions in $(NH_4)_3TiF_7$ detected by optic and calorimetric studies, *Journal of Fluorine Chemistry* 165 (2014) 14-19.
- [3] A. Kartashev, M. Gorev, E. Bogdanov, I. Flerov, N. Laptash, Thermal properties and phase transition in the fluoride, $(NH_4)_3SnF_7$, *Journal of Solid State Chemistry* 237 (2016) 269–273.
- [4] P. Lloveras, J.-L. Tamarit, Advances and obstacles in pressure-driven solid-state cooling: A review of barocaloric materials, *MRS Energy and Sustainability* 8 (2021) 3–15.
- [5] M. Gorev, E. Bogdanov, I. Flerov, T-p phase diagrams and the barocaloric effect in materials with successive phase transitions, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 50 (38) (2017) 384002.

Исследование кинетики фазового перехода II рода в открытой системе на примере формирования бозе-конденсата экситонных поляритонов

Елистратов А.А.¹, Асриян Н.А.¹, Макаров Д.В.², Аллилуев А.Д.²,
Лозовик Ю.Е.^{1,3}

¹ *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова,
Росатом, Москва, Россия
e-mail: andrei.a.elistratov@mail.ru*

² *Тихоокеанский океанологический институт им. В.И. Ильичева, ДО РАН,
Владивосток, Россия
e-mail: makarov@poi.dvo.ru*

³ *Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия
e-mail: lozovik@mail.ru*

Накопление частиц в основном состоянии в бозонных системах при низких температурах — бозе-эйнштейновская конденсация (БЭК) - было предсказано Эйнштейном в 1905 году, но понадобилось 90 лет, прежде чем это явление было продемонстрировано в 1995 году экспериментально на холодных атомах. Зато первое десятилетие 21-го столетия ознаменовалось парадом конденсаций квазичастиц в твердых телах: экситонные поляритоны — 2006 год [1], магноны - 2006 год [2], фотоны — 2010 год [3], экситоны — 2012 год [4].

БЭК квазичастиц в твердых телах, хотя и является фазовым переходом второго рода, вместе с тем имеет свои особенности, связанные в основном с тем, что подсистема квазичастиц в твердом теле является открытой, интенсивно взаимодействующей с другими подсистемами, такими как, например, кристаллическая решетка, электроны проводимости и пр. Совокупность систем, интенсивно взаимодействующих с рассматриваемой подсистемой квазичастиц, образует для нее тепловой резервуар или несколько резервуаров, каждый из которых обладает собственной температурой и химическим потенциалом. Между системой и этими резервуарами может происходить как взаимодействие частиц, так и обмен частицами. В результате квазичастицы в системе обладают конечным временем жизни, зачастую меньшим, чем характерные времена процессов в тепловом резервуаре. Происходит утечка квазичастиц, требующая постоянной или импульсной накачки. Это приводит к неравновесности фазового перехода — из-за постоянной утечки частицы не успевают термализоваться, т. е. не устанавливается распределение Бозе-Эйнштейна. Кроме того, квазичастицы зачастую обладают видоизмененным законом дисперсии: в окрестности нулевого импульса спектр имеет не звуковой, боголюбовский, а чисто диффузионный характер. Наконец, одновременное наличие нескольких временных масштабов приводит, в ряде случаев, к необходимости немарковского описания таких систем, т. е. учета влияния

прошлых состояний на динамику системы в текущий момент.

Для более детального анализа кинетики фазового перехода мы рассматриваем в качестве примера БЭК экситонных поляритонов в полупроводниковой квантовой яме, погруженной в оптическую микрополость [5]. Экситонные поляритоны являются квазичастицами, представляющими собой квантовую суперпозицию экситонов квантовой ямы и фотонов оптической микрополости. Нами предложена одномодовая модель, рассчитывающая из первых принципов собственно энергетическую часть функции Грина поляритонов конденсата, возникающую вследствие взаимодействия с экситонами, образующими резервуар [6]. Взаимодействие фотонов, входящих в состав поляритона, с пустым фотонным резервуаром, находящимся за пределами микрополости, мы учитываем простейшим образом, вводя соответствующий коэффициент затухания, обратный времени жизни фотонов в микрополости. Мы показываем, что включая в уравнение движения для конденсатных поляритонов зависимость интенсивности обмена частицами с резервуаром от энергии резервуарных мод, можно описать выход на равновесие не только плотности конденсата, но и скорости вращения его фазы. Таким образом, предложенная модель позволяет впервые теоретически реализовать сценарий формирования параметра порядка как процесс спонтанного нарушения симметрии, присутствующей в исходном лагранжиане, в среднеполевом приближении играющем роль функционала Ландау.

Отметим, что в последнее время проводятся эксперименты с микрополостями, изготовленными из TMDC-материалов, утечка фотонов в которых происходит особенно интенсивно. Для описания БЭК в таких системах приходится вводить в уравнение движения конденсата интегральный член, описывающий взаимодействие с резервуаром как процесс, зависящий от прошлых состояний резервуара, т.е. переходить к немарковскому описанию процесса образования конденсата. В рамках немарковского подхода нами открыт ряд качественных эффектов: бистабильность конденсата в определенной области пространства параметров системы, которая говорит о вероятностном характере возникновения конденсата при одних и тех же управляющих параметрах системы; возрождение конденсата в процессе его затухания при резком включении интенсивного взаимодействия с резервуаром; отличие корреляционной функции второго порядка g^2 от единицы как следствие наличия квантовых временных корреляций в конденсате, возникающих в немарковской системе. Все эти эффекты ждут экспериментального исследования.

Наконец, пространственное описание поведения конденсата требует выхода за пределы одномодовой модели, что делает задачу недоступной для аналитического исследования и приводит к необходимости

компьютерного моделирования [7]. В то же время, есть ряд результатов, по большей части возникших в рамках различных ренормгрупповых подходов, которые должны воспроизводиться компьютерным моделированием. В настоящее время мы занимаемся верификацией численных алгоритмов.

- [1] J.Kasparzak et al., Nature **443**, 409 (2006).
- [2] S.O.Demokritov et al., Nature **443**, 430 (2006).
- [3] J.Klaers et al., Nature **468**, 545 (2010).
- [4] A.A.High et al, Nature **483**, 584 (2012).
- [5] A.A.Elistratov and Yu.E.Loikov, Phys. Rev. B **97**, 014525 (2018).
- [6] N.A.Asriyan, A.A.Elistratov and Yu.E.Loikov, Quantum, принята к печати.
- [7] A.D.Alliluev, D.V.Makarov, N.A.Asriyan, A.A.Elistratov and Yu.E.Loikov, Phys. Lett. A **453**, 128492 (2022).

Необычное фазовое поведение трёх и четырёхкомпонентных углеводородных смесей с малым содержанием компонентов фракции C_{4+}

Булейко В.М., Григорьев Б.А., Булейко Д.В.
РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М.Губкина

В Московском центре исследования пластовых систем (керна и флюиды) ООО «Газпром ВНИИГаз» на базовой кафедре РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М.Губкина с использованием метода прецизионной адиабатической калориметрии проводятся исследования углеводородных смесей с малой концентрацией компонентов фракции C_{4+} . Важность проводимых исследований обусловлена необходимостью разработки месторождений, представленных пластовыми флюидами с низким конденсатогазовым фактором (Чаяндинское НГКМ, Ковыктинское ГКМ и т.д.).

Исследованы трёх и четырёхкомпонентные смеси метана, пропана и фракции C_{4+} , представленные как псевдобинарные. Первый псевдокомпонент – бинарная смесь с постоянным соотношением метан/пропан (макрофаза). Второй псевдокомпонент представлен компонентами фракции C_{4+} , образующих микрофазы. На основе измеренных значений внутренней энергии и плотности термодинамического потенциала $\Omega = -PV$, а также их температурных производных (температурного коэффициента давления, изохорной теплоёмкости при постоянном объёме) в диапазоне температуры 110–420 К и при давлении до 60 МПа построены фазовые диаграммы исследованных смесей.

Необычность фазового поведения углеводородных смесей с малой концентрацией высокомолекулярных компонентов фракции C_{4+} предопределяет научную новизну предлагаемого доклада. Наши исследования показали, что фазовое поведение углеводородных смесей с малой концентрацией компонентов фракции C_{4+} трансформировано по сравнению с традиционными представлениями:

- пластовые флюиды расслаиваются на макро- и микрофазы;
- каждая микрофаза состоит из одного высокомолекулярного компонента;
- каждый высокомолекулярный компонент провоцирует расслоение жидкой части макрофазы на две фазы: фазу, обогащённую и фазу, обеднённую высокомолекулярными компонентами;
- фазовое поведение микрофазы предопределяется составом макрофазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 23-29-00088, <https://rscf.ru/en/project/23-29-00088/>.

Влияние различных режимов имплантации ионов кобальта на величину критического тока ВТСП композитов

Руднев И.А.^{1,2}, Абин Д.А.¹, Стариковский А.С.¹, Покровский С.В.^{1,2},
Батулин Р.Г.², Федин П.А.³, Прянишников К.Е.³, Кулевой Т.В.³

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

²Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

⁴Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия
e-mail: iarudnev@mephi.ru

Современные высокотемпературные сверхпроводящие ленточные композиты имеют достаточно сложную композитную структуру, которая состоит из подложки на основе сплава Хастеллой толщиной порядка 60 мкм, нескольких тонких буферных оксидных слоев и слоя в 2 мкм непосредственно высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП) $REBa_2Cu_3O_{7-x}$ (RE – редкоземельный элемент, например, Y или Gd). Вся структура закрыта защитными слоями из серебра и меди (Рис. 1). Такие сверхпроводящие материалы демонстрируют огромные плотности критического тока (несколько единиц МА на кв. см сечения) даже при температуре кипения жидкого азота. Вместе с тем для многих практических применений проблема увеличения критического тока ВТСП лент как в нулевом поле, так и в магнитных полях и различных температурах остается актуальной и требующей решения.

Хорошо известно, что увеличение критического тока достигается за счет создания в ВТСП материале центров пиннинга магнитного потока – структурных дефектов. Для этого применяются различные методы от формирования дефектов на этапе синтеза до радиационных воздействий, приводящих к появлению радиационных дефектов различного типа.

Вместе с тем, пиннинг можно усилить, добавив к структурным дефектам магнитные, которые за счет дополнительного магнитного взаимодействия приведут к увеличению силы пиннинга. Так, работе [1] нами было показано, что имплантация магнитных ионов Fe^+ может приводить к увеличению критического тока ВТСП композитов.

В настоящем докладе мы приводим подробные данные по влиянию облучения магнитными ионами Co^{2+} на намагниченность и критический ток ВТСП композитов. Облучение образцов проводилось несколькими флюенсами для 4х различных режимов создания дефектов при которых

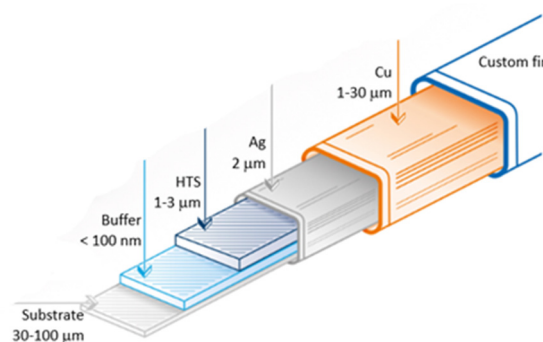


Рис.1 Архитектура ВТСП композита.

последовательно имплантация ионов отсутствовала, а затем концентрация магнитных ионов в ВТСП слое повышалась вплоть до режима полной остановки ионов в сверхпроводящей матрице (брэгговский пик находился в середине ВТСП слоя). Различные режимы имплантации были реализованы за счет вариации толщин серебряного слоя, что приводило к различным проективным пробегам ионов, которые были предварительно рассчитаны с помощью пакета SRIM. До облучения удалялись все защитные слои, кроме слоя Ag.

Было показано, что при определенных условиях облучения и режимов имплантации магнитных ионов Co^{2+} наблюдается повышение намагниченности и критического тока как в нулевом поле, так и в полях до 8 Тл (Рис.2).

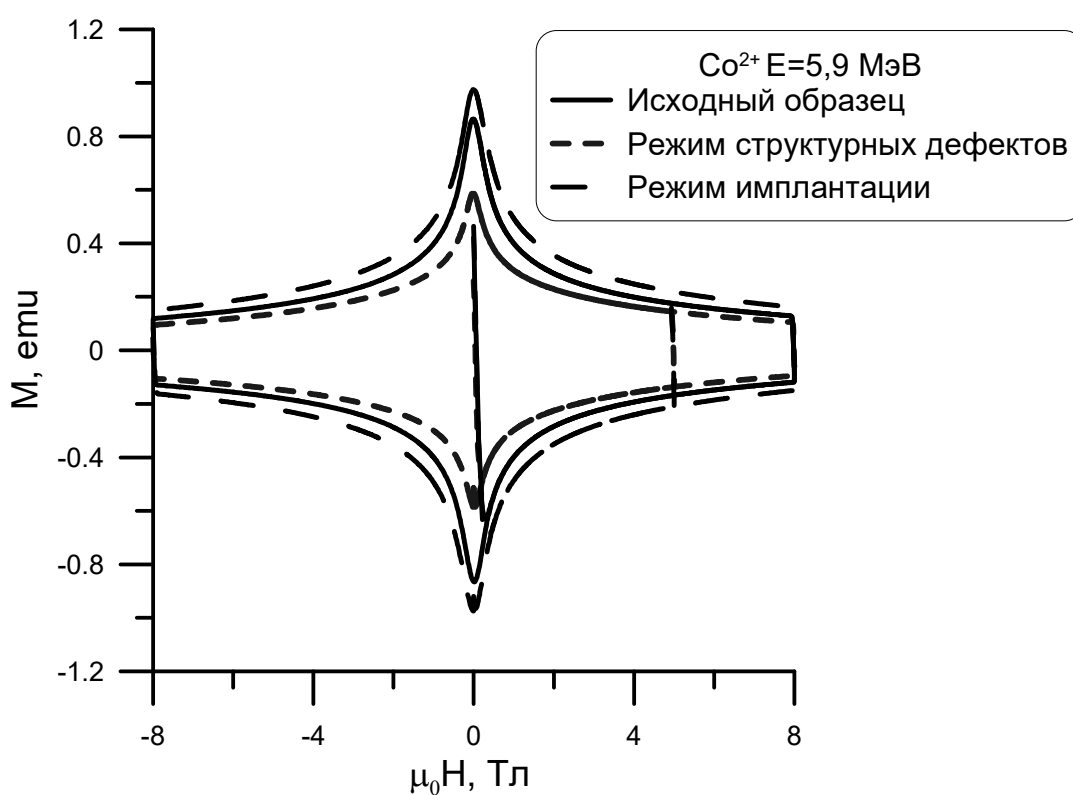


Рис.2 Увеличение намагниченности ВТСП композитов при имплантации ионами Co^{2+} .

В докладе будут проанализированы полученные результаты, предложена физическая модель, объясняющая экспериментальные данные.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00394, <https://rscf.ru/project/23-19-00394/>.

- [1] И.А. Руднев, А.И. Подливаев, Д.А. Абин, С.В. Покровский, А.С. Стариковский, Р.Г. Батулин, П.А. Федин, К.Е. Прянишников, Т.В. Кулевой, ФТТ **65**, 386 (2023).

Фазовые равновесия и процессы затвердевания в сплавах Al-Cu-Fe и Al-Cu-Co

Камаева Л.В.¹, Циок Е.Н.¹, Щелкачев Н.М.²

¹ Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

e-mail: lara_kam@mail.ru

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

В работе проведены экспериментальные и теоретические исследования структурного состояния расплавов Al-Cu-Fe и Al-Cu-Co в жидком и переохлажденном состояниях при нормальном и повышенном давлениях, а также фазовых равновесий и процессов фазообразования в сплавах этих систем в области богатой Al.

Методами дифференциального термического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии исследованы фазовые превращения, происходящие в сплавах Al-Cu-Fe и Al-Cu-Co при нагреве до 1400°C и охлаждении со скоростями до 1К/с при нормальном давлении. С помощью рентгеноструктурного и металлографического анализов изучены структура и морфология образующихся в результате такого медленного охлаждения твердых фаз. Также проведен сравнительный микроструктурный анализ образцов, полученных в одинаковых условиях охлаждения при нормальном и высоком (до 8ГПа) давлениях. Для выявления влияния исходной жидкой структуры на процессы фазообразования методами молекулярной динамики с использованием методов машинного обучения исследована структура и химический ближний порядок расплавов Al-Cu-Fe и Al-Cu-Co.

Показано, что в системе Al-Cu-Fe стехиометрия i-фазы совпадает с инвариантным равновесием, которое приводит к излому на линии ликвидуса в этой области концентраций. В системе Al-Cu-Co также наблюдаются равновесия $L + Al_{13}Co_4 \leftrightarrow L + \beta(Cu_3Al(Co))$ при 17 ат.% Cu и 15 ат.% Co и $L + d \leftrightarrow L + \beta$ при 25 ат.% Cu и 10 ат.% Co, но в области стехиометрии d-фазы линии ликвидуса гладкие. Исследование процессов затвердевания при нормальном давлении показывает, что и в системе Al-Cu-Fe, и Al-Cu-Co эвтектическая кристаллизация наблюдается для сплавов, богатых Al до концентраций Cu, Fe и Co, соответствующих инвариантным превращениям. Следует отметить, что в системе Al-Cu-Co в этой области концентраций (2,5-10 ат.% Co, 25 ат.% Cu) на первом этапе затвердевания должна образовываться d-фаза. Однако рентгеноструктурные и металлографические исследования показывают, что образование d-фазы в сплавах наблюдается только при малых скоростях охлаждения (<0,1 К/с). При скоростях охлаждения 0,1–1 К/с d-фаза образуется в сплавах с концентрацией Co 11 ат.% и более, по перитектической реакции из β -фазы.

В области стехиометрии i -фазы величина переохлаждения, в условиях которого начинается затвердевание, в зависимости от состава изменяется от 20 до 65°C. Кристаллизация сплавов с содержанием меди до 25,5 ат.% начинается с образования интерметаллида Al_3Fe , при концентрации от 25,5 до 35 ат.% Cu на первой стадии выделяются кристаллы твердого раствора на основе Cu_3Al . В области концентраций, где i -фаза зарождается первой из расплава ($Al_{95,5+x}Cu_{35,5-x}Fe_{5,8}$, где $x=0-15$), величина переохлаждения и характер кристаллизации зависят от температуры расплава перед охлаждением. При охлаждении от температур <1050°C сплавы затвердевают в условиях небольших переохлаждений согласно диаграмме состояния, а при увеличении температуры в условиях больших переохлаждений (более 60°C) кристаллизация протекает без образования i -фазы. При затвердевании сплавов с небольшим содержанием Fe в условиях высоких давлений квазикристаллическая фаза в их составе сохраняется до комнатных температур.

Применение первопринципной молекулярной динамики и машинного обучения MLIP (Machine Learning Interatomic Potentials) на основе нейронных сетей tensor flow и пакета DEEPMD позволило построить межатомные потенциалы взаимодействия для тройных систем сплавов Al-Cu-Fe и Al-Cu-Co при нормальном давлении, а для системы Al-Cu-Fe при давлении 0-10 ГПа. В результате были рассчитаны полные и парные функции радиального распределения атомов и определены основные характеристики ближнего порядка для двух сплавов Al-Cu-Fe: $Al_{62}Cu_{25,5}Fe_{12,5}$ и $Al_{72}Cu_{15,5}Fe_{12,5}$ при постоянной температуре $T=1273$ К (вблизи температуры ликвидус), нормальном ($P=0$ ГПа) и высоком ($P=10$ ГПа) давлениях. Под действием высокого давления максимальные изменения наблюдаются для сплава $Al_{72}Cu_{15,5}Fe_{12,5}$. Воздействие давлением $P=10$ ГПа привело к уменьшению радиуса первой координационной сферы, а также к значительному разбросу его значений для различных пар атомов. Ближний порядок в расплавах Al-Cu-Fe представлен в основном искаженными политетраэдрическими полиэдрами Каспера с числом ближайших соседей, близким для замкнутых упакованных систем ($Z = 12$). При высоком давлении в образцах Al-Cu-Fe для атомов Fe наблюдается тенденция к зарождению локального икосаэдрического порядка.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00912, <https://rscf.ru/project/22-22-00912/>

Квантовый спектральный фазовый переход в параметрическом усилителе бегущей волны

Ремизов С.В.^{1,2,3}, Елистратов А.А.¹, Лебедев А.В.¹

¹ *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова (ФГУП «ВНИИА»), Москва, Россия*

² *Институт радиотехники и электроники (ИРЭ) РАН, Москва, Россия*

³ *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ), Москва, Россия
e-mail: sremizov@gmail.com.ru*

В последнее время большой интерес вызывают неравновесные системы и физика происходящих в них процессов, в связи с чем бурно развивается теория так называемых неравновесных фазовых переходов. Хотя хорошо разработанная теория равновесных фазовых переходов для таких систем не применима, но оказывается, что можно провести некоторые аналогии. Так, в работе [1] приведены результаты эксперимента и предложено теоретическое объяснение с использованием классического подхода так называемого спектрального фазового перехода в оптическом параметрическом осцилляторе (ОПО).

ОПО представляет собой нелинейную среду, осуществляющую трехволновое смешивание. В работе [1] ОПО, помещённый в резонатор с перестраиваемой резонансной частотой, рассмотрен как среда с затуханием под действием накачки. Нелинейность в данной системе приводит к взаимодействию между модами и, как следствие, распаду моды накачки на две (сигнальную и холостую моды), частоты которых находятся вблизи половины частоты накачки. Авторами были рассмотрены флуктуации амплитуд сигнальной и холостой мод в стационарном режиме, при этом наблюдался разный характер неустойчивости в зависимости от знака отстройки частоты резонатора от частоты накачки. В одном случае максимум амплитуды флуктуаций достигался в вырожденном случае, когда частоты сигнальной и холостой моды совпадали, в другом случае частоты этих мод существенно различались, причём эта зависимость носит бифуркационный характер, что объяснялось компенсацией дисперсии групповой скорости отстройкой частоты резонатора в последнем случае. Используя производную усиления по отстройке как параметр порядка, авторы показывают, что данная величина линейно убывает в вырожденном режиме и в точке бифуркации обращается нуль. Это позволило авторам трактовать описываемый эффект как фазовый переход второго рода.

Нами была исследована другая нелинейная среда – параметрический усилитель бегущей волны (ПУБВ). Рассмотренная нами реализация ПУБВ представляет из себя набор из конечного числа джозефсоновских переходов. Нами исследован спектр сигнала на выходе ПУБВ в случае когда о на вход подан постоянный когерентный сигнал. Наличие

четырёхволнового смешивания в ПУБВ приводит к возможности спонтанного распада моды накачки на холостую и сигнальную моды, которые затем усиливаются, что приводит к широкой полосе генерации в окрестности частоты накачки. С одной стороны в такой постановке задачи в первом приближении можно пренебречь эффектами, связанными с затуханием, с другой стороны конечный размер не позволит получить настоящий фазовый переход, однако, можно найти следы такого перехода в кроссовере, который мы наблюдаем в рассматриваемой системе. Отличия рассмотренного нами ПУБВ от ОПО, такие как четырёх волновое смешение вместо трёхволнового, наличие дополнительной степени свободы, связанной с координатой в контексте рассматриваемой задачи не являются принципиальными.

Для описания кинетики ПУБВ мы применили развитый нами ранее теоретико-полевой подход на основе диаграммной техники Келдыша. Использование формализма Намбу позволило нам включить в рассмотрение аномальные средние для бозонных операторов и в конечном итоге вывести кинетическое уравнения для нормальной и аномальной компонент заселенности мод, причём наличие аномальной компоненты играет ключевую роль в развиваемой нами теории.

Еще одним ключевым моментом было рассмотрение цепочки джозефсоновских переходов с чередующимися параметрами. Исследование полученных кинетических уравнений показало реализации в ПУБВ эффекта, схожего с описанным выше спектральным фазовым переходом в ОПО. Мы показали, что при специальном выборе параметров ПУБВ наблюдается бифуркация в частотой зависимости частоты максимальной генерации в зависимости от частоты накачки (см. рис. 1). При частотах накачки меньше критической основная генерация происходит вблизи частоты накачки. При дальнейшем увеличении частоты накачки происходит резкое увеличение мощности сгенерированного сигнала, при этом также происходит снятие вырождения, и частоты максимального сигнала в холостой и сигнальной модах начинают существенно различаться.

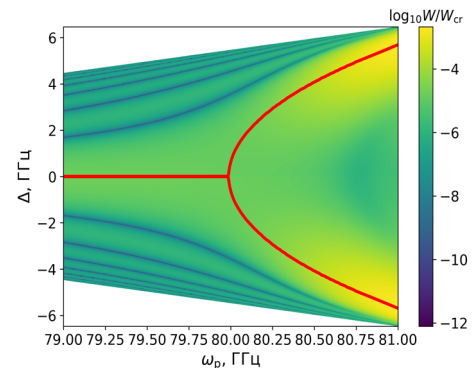


Рис.1 карта спектральной мощности излучения W на выходе ПУБВ, Тут Δ – отстройка от частоты накачки ω_p , красной линией обозначена максимальная мощность.

Как в рассмотренном нами ПУБВе, так и в упомянутом выше ОПО реализуется необычный сценарий фазового перехода второго рода. В привычной теории Ландау фазовый переход описывается гамильтонианом степени выше двойки с постоянными коэффициентами и с единственным полем. Рассмотренный нами ПУБВ также, вообще говоря, описывается

нелинейным гамильтонианом, однако, его кинетику эффективно можно описать с помощью двух полей (аномальная и нормальная компонента заселённости) образующих квадратичный гамильтониан, в коэффициенты которого существенным образом входит взаимодействие.

С физической точки зрения рассмотренную нами задачу можно рассматривать и как задачу о фазовом переходе «наоборот», когда рассматривается задача не об образовании конденсата, а о его распаде, при этом роль конденсата играет когерентная накачка. Фазовый переход происходит при изменении частоты накачки и заключается в переходе из состояния, в котором распад моды накачки слабо выражен, в состояние, в котором такой распад происходит достаточно эффективно.

[1] Roy, A., Jahani, S., Langrock, C. et al., Nat Commun **12**, 835 (2021).

Переходные процессы в пленках высокотемпературных сверхпроводников под действием фемтосекундного лазерного излучения

Мартиросян И.В.^{1,2}, Руднев И.А.^{1,2}, Покровский С.В.^{1,2}, Юсупов В.Р.²,
Петров А.В.²

¹ *Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ», Москва, Россия*

² *Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*

e-mail: mephizic@gmail.com

Исследования неравновесных состояний конденсированных сред являлось одной из первоочередных задач физики твердого тела начиная с 1960-х годов. После открытия купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) и одновременным быстрым развитием спектроскопии сверхкоротких лазерных импульсов стало очевидно, что для наблюдения фотовозбужденных неравновесных состояний и связанных с ними переходных процессов в ВТСП требуются экспериментальные методы с фемтосекундными временами разрешения [1]. В этом случае высокая интенсивность излучения достигается при малой энергии импульса, что дает уникальную возможность исследовать взаимодействие высокоинтенсивного излучения с веществом без термического разрушения образца. Исследование в режиме реального времени динамики квазичастиц (КЧ) в пленках $REBa_2Cu_3O_{7-x}$ (где RE-редкоземельный элемент) стало возможным с применением спектроскопии накачки-зондирования (pump-probe spectroscopy) [2–5], при этом образец возбуждается импульсом накачки и зондируется пробным импульсом при определенном времени задержки между импульсами возбуждения и зондирования.

В рамках представленной работы исследование методом оптического зондирования динамики отражательной способности открытой ВТСП пленки $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ (толщина 1 мкм) на подложке сплава Hastelloy C-276 (толщина 100 мкм) осуществлялось с использованием фемтосекундного Ti:Sapphire лазерного комплекса (рисунок 1). Оптическое зондирование осуществлялось на длине волны 800 нм при длительности импульса 50 фс. Длина волны линейно поляризованного луча, падающего вдоль оси с пленки соответствует энергии фотона ~ 1.5 эВ. Накачивающий луч значительно превосходит зондирующий по размерам лазерного пучка и по интенсивности, так что сам зондирующий луч не вносит вклад в оптический отклик, а зондирование происходит в той области образца, где возбуждающий луч был практически однороден по интенсивности. Для всех исследованных случаев глубина проникновения лазерного излучения (< 100 нм) значительно меньше толщины ВТСП пленки, поэтому вклад в оптический отклик вносит только слой сверхпроводника.

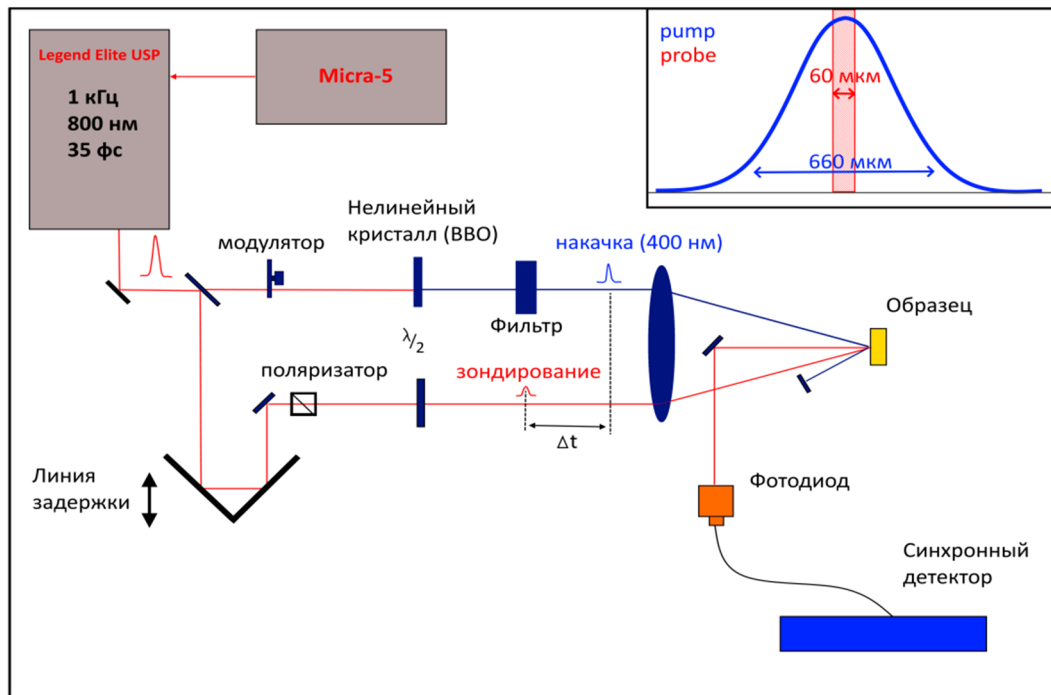


Рис.1. Блок схема фемтосекундного лазерного комплекса. На вставке – соотношение диаметров накачивающего и зондирующего лазерных лучей.

На рисунке 2 приведены временные зависимости изменения фотоиндуцированной отражательной способности сверхпроводящей пленки при $T > T_c$ и $T < T_c$ для нескольких исследованных энергий накачивающего лазерного луча. Отметим ряд особенностей. Для нормальной фазы пик оптического отклика всегда ниже, нежели для сверхпроводящей, а скорость релаксации электронной подсистемы выше (более быстрый временной спад зависимости). Тенденция роста ширины и амплитуды пика оптического отклика при увеличении плотности потока лазерного излучения сохраняется как для СП фазы, так и для нормальной фазы.

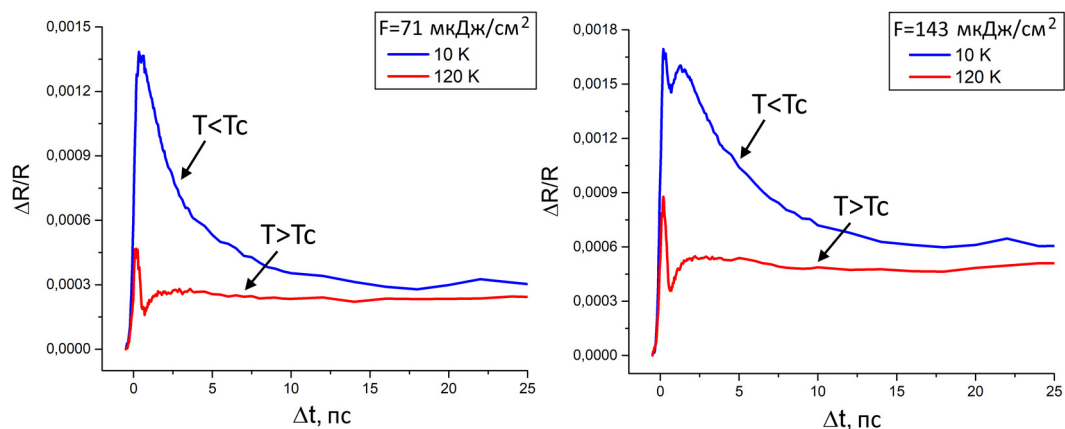


Рис.2. Изменение отражательной способности пленки YBCO при $T > T_c$ и $T < T_c$ для различных энергий лазерного излучения.

За времена порядка 0.5 пс наблюдается пик изменения отражательной способности, связанный с быстрым откликом электронной подсистемы, после чего проявляется спад отражательной способности, а затем накопительный рост сигнала, связанный с накоплением популяции квазичастиц и их релаксацией с испусканием новых квазичастиц, выходящих на поверхность пленки за время τ порядка нескольких пикосекунд.

Полученные в работе оптические отклики обсуждаются в рамках феноменологической модели Ротварфа и Тейлора с использованием рассчитанных чистых сверхпроводящих откликов пленок в интервале температур от 5 до 200 К. Лазерные импульсы накачки сначала возбуждают электроны из занятых состояний в незанятые в пределах 1,5 эВ от уровня Ферми. Сразу после этого происходит ливинообразный процесс размножения квазичастиц, который хорошо изучен в металлах, а также в купратах. Сверхпроводимость очень чувствительна к энергии падающего фотона, превышающей энергию связи куперовских пар. В случае $T < T_c$ часть энергии лазерного излучения расходуется на разрушение куперовских пар и возбуждение носителей на более высокие уровни энергий. Затем фотовозбужденные носители релаксируют в состояния, близкие к энергии Ферми, за счет внутризонного электрон-электронного рассеяния, происходящего в типичном временном масштабе $\tau_{(e-e)} \leq 50$ фс и рассеяние на фононах, в основном на тех, которые наиболее сильно связаны с квазичастицами, что приводит к значительной неравновесной популяции квазичастиц и фононов в течение ~ 100 фс после фотовозбуждения. Следующий этап релаксации - рекомбинация квазичастиц через сверхпроводящую энергетическую щель (или псевдощель) с испусканием бозона с энергией $\geq 2\Delta$, занимает значительно больше времени и обычно хорошо описывается моделью Ротварфа и Тейлора. Показано, что динамика оптического отклика описывается уравнениями Ротварфа-Тейлора лишь ниже некоторого порога интенсивности и температур, тогда как выше данного порога быстрый электронный отклик накладывается на более медленную динамику, связанную с восстановлением сверхпроводимости.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российской Федерацией в лице Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Соглашение № 075-15-2021-1352 (И.В. Мартиросян, И.А. Руднев, С.В. Покровский).

- [1] L. R. Testardi, Phys. Rev. B 4, 2189 (1971).
- [2] S. G. Han, Z.V., Phys. Rev. Lett. 65, 2708 (1990).
- [3] J. M. Chwalek, Appl. Phys. Lett. 58, 980 (1991).
- [4] W. Albrecht, Th. Kruse, and H. Kurz, Phys. Rev. Lett. 69, 1451 (1992).
- [5] C. J. Stevens et al., Phys. Rev. Lett. 78, 2212 (1997).

Особенности структурных превращений углеродных материалов

Фазлитдинова А.Г., Тюменцев В.А.

Челябинский Государственный Университет, Челябинск, Россия

e-mail: fazlitdinovaag@mail.ru

Применение углеродных материалов (УМ) обусловлено их уникальными свойствами, определяющие технический и технологический прогресс. В настоящее время в больших объемах производят так называемые графитированные материалы на основе нефтяных и пековых коксов, а также углеродные волокнистые материалы. Особенности перехода прекурсора углеродного материала в графит при высокотемпературной и термомеханической обработке, а также разрушения структуры графита в процессе нейтронного облучения или длительного механического диспергирования были предметом многочисленных исследований. Методом рентгеновской дифракции [1-3] показано, что в процессе высокотемпературной обработки наблюдается непрерывное уменьшение межплоскостных расстояний d_{002} углеродного материала. В то же время имеются данные о наличие ступенчатого изменения значений d_{002} , наблюдаются плато при значениях, равных 3.36, 3.37, 3.40, 3.425 и 3.44 Å [3].

В данной работе методами рентгеновской дифракции и спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) рассмотрены особенности структурных превращений углеродных материалов как в процессе высокотемпературной обработки, так и в процессе механического диспергирования графита.

Исследование последовательности структурных превращений графитированных углеродных материалов в процессе термообработки проведены на образцах высокосернистого пекового кокса (содержание серы 1,3 масс.%), предварительно карбонизированного в виде цилиндра при 900°C в течение 3 часов. Часть образцов содержала добавку дисперсного Fe_2O_3 в количестве 0,75 масс.%. Далее высокотемпературная обработка проводилась в интервале 1200 – 2600°C в течение 3 часов (скорость подъема температуры до заданной 300°C/ч).

Рентгеновские дифракционные исследования выполнены на фильтрованном $CuK\alpha$ излучении (дифрактометр D8 Advance, Bruker, инструментальное уширение максимума 002 составляет 0,06 градуса) в геометрии Брегга-Брентано (сканирование θ/θ , шаг по углу 0.025°). КР спектры регистрировали в широком спектральном диапазоне 250-4000 cm^{-1} с помощью лазерного КР спектрометра фирма InSpectr с длиной волны 532 нм, оснащенного микроскопом и цифровой камерой.

Как показано в работе [4] профили дифракционных максимумов 002 образцов исследованного графитированного углеродного материала,

прошедших термообработку при 1200 – 2600°C не симметричны. Это может быть обусловлено одновременным присутствием метастабильных углеродных фаз, отличающихся значением межплоскостного расстояния: $d^1_{002} = 0,335$, $d^2_{002} = 0,337$, $d^3_{002} = 0,340$, $d^4_{002} = 0,3425$, $d^5_{002} = 0,3440$ и $d^6_{002} = 0,355/0,368$ нм (обозначение компонент, соответствующие этим значениям межплоскостных расстояний, как $K_1, K_2, \dots K_6$).

С помощью программного обеспечения Origin профили характерного максимума 002 углеродного материала были разложены на компоненты. Дифракционный максимум может быть представлен в виде суперпозиции не более трех компонент, описываемых симметричными функциями. На рис.2 представлено изменение компонентного состава исследуемых графитированных материалов в процессе высокотемпературной обработки.

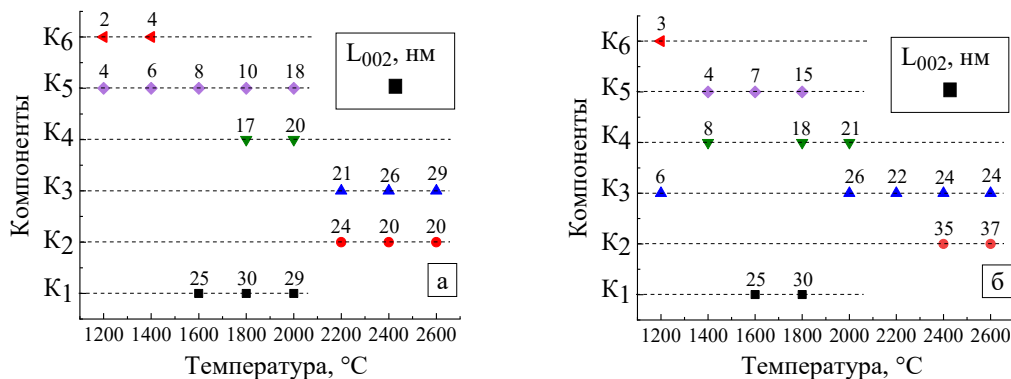


Рис.1. Изменение компонентного состава углеродного материала, прошедшего термообработку при 1200...2600 °C без добавки (а) и с содержанием добавки дисперсного Fe_2O_3 (б). Над маркером обозначены средние размеры ОКР (002), нм

Систематическое исследование КР спектров образцов УМ показало, что материал неоднороден. На спектре исследуемых образцов фиксируются характерные линии D ($\sim 1350 \text{ см}^{-1}$) и G ($\sim 1580 \text{ см}^{-1}$). В ходе проведения картирования по образцу с шагом 500 мкм (~ 50 измерений на каждый образец) наблюдается различное соотношение линий I_D/I_G , определяющее степень разупорядоченности материала, рис.2. Так для углеродного материала, прошедшего термообработку при 1200°C степень разупорядоченности составляет $\sim 0,80$, рис.3. Повышение температуры обработки до 1400°C приводит к увеличению значения I_D/I_G до $\sim 0,95$. По мере повышения температуры обработки значение I_D/I_G постепенно уменьшается. Для материала, пропитанного оксидом железа, уменьшение степени разупорядоченности происходит медленнее в процессе термообработки. При более высокой температуре 2600°C степень разупорядоченности для материала без пропитки на $\sim 12\%$ меньше и составляет 0,32.

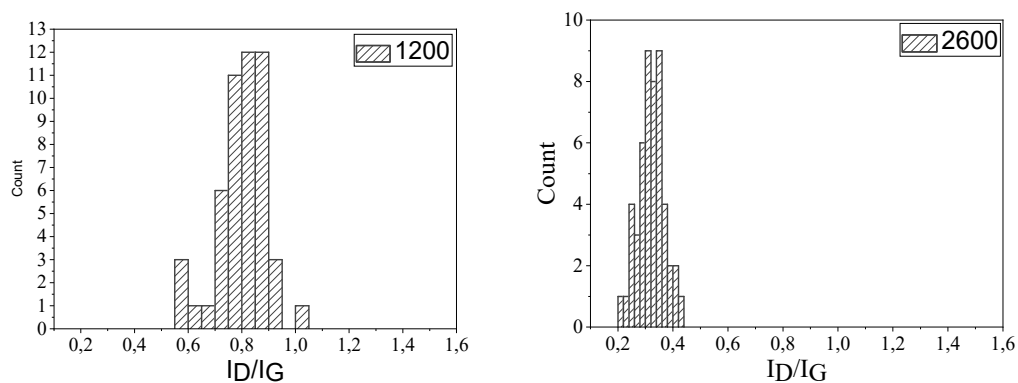


Рис.2. Гистограмма распределения значений отношений I_D/I_G в спектрах КР образцов углеродного материала, прошедшего обработку при 1200 и 2600°C без добавки

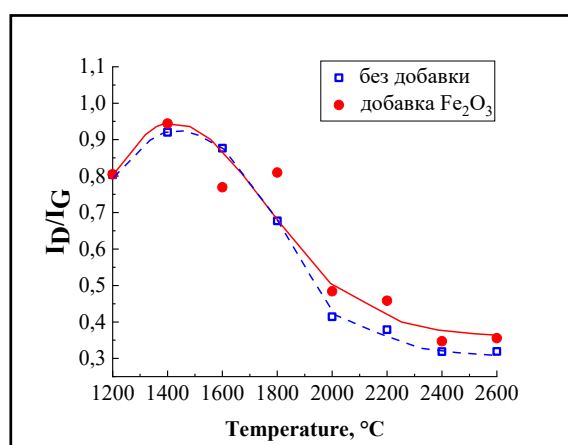


Рис.3. Изменение степени разупорядоченности I_D/I_G углеродных материалов в процессе высокотемпературной обработки

Таким образом, углеродный материал гетерогенен в процессе высокотемпературной обработки, переход материала в более равновесное состояние развивается через ряд метастабильных состояний.

- [1] F. Liu F., H.Wang, L.Xue, Mater. Sci. **43(10)**, 4316 (2008).
- [2] V.M. Samoilov, D.B. Verbets, I.A. Bubnenkov, N.N. Stepanyova, et al., Inorganic Materials: Applied Research, **9(5)**, P. 890 (2018)
- [3] J. Lachter, R.M. Bragg, Phys. Rev. B, **33(12)**, 8903 (1986)
- [4] В.А. Тюменцев, А.Г. Фазлитдинова, Известия Вузов, Серия «Химия и химическая технология», **65(3)**, 6 (2022)

Локальный параметр порядка в твердом растворе $\text{Ba}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{TiO}_3$, легированном висмутом

Попов И.И., Гриднев С.А.

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

e-mail: porovich_yano@mail.ru

На частоте 1 кГц измерена температурная зависимость диэлектрической проницаемости $\varepsilon(T)$ в керамическом твердом растворе $\text{Ba}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{TiO}_3$, легированном 10 ат. % Вi. Видно (рис. 1), что максимум $\varepsilon(T)$ занимает область температур ~ 200 К, что свидетельствует о сильном размытии фазового перехода. Свойства сегнетоэлектриков с размытым фазовым переходом обусловлены образованием локальных полярных областей при температуре Бернса T_d , которая выше температуры максимума диэлектрической проницаемости T_m . Для оценки температурной зависимости локального параметра порядка была использована формула, полученная на основе термодинамической теории Ландау-Девоншира [1]

$$\varepsilon^{-1}(T) = \frac{(T - T_0)}{C_w} + \varepsilon_0 \gamma q(T),$$

где T_0 – температура Кюри-Вейсса, C_w – константа Кюри-Вейсса, ε_0 – электрическая постоянная, γ – термодинамический коэффициент, q – локальный параметр порядка.

По температурной зависимости локального параметра порядка (рис. 1) определена температура возникновения полярных областей $T_d \approx 394$ К, которая хорошо совпадает с температурой начала выполнения линейного закона Кюри-Вейсса. Отметим, что в чистом $\text{Ba}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{TiO}_3$ интервал между T_0 и T_d , характеризующий сосуществование полярной и неполярной фаз, составляет ≈ 37 К. Добавка 10 ат. % Вi приводит к увеличению температурного интервала до ≈ 200 К. Обсуждаются причины размытия фазового перехода.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (проект № FZGM-2023-0006).

[1] L.Mitoseriu, A.Stancu, C.Fedor, P.M.Vilarinho, J. Appl. Phys. **94**, 1918 (2003).

[2] S.A.Gridnev, I.I.Popov, Ferroelectrics **561**, 127 (2020).

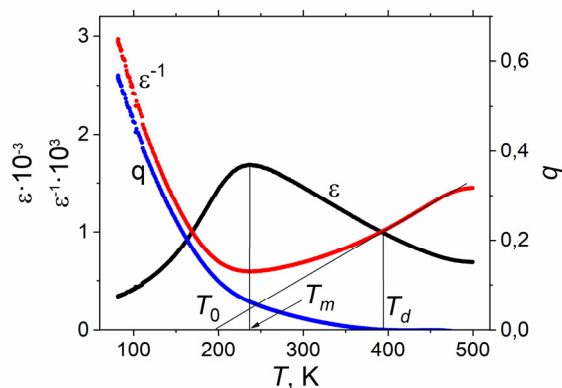


Рис.1. Температурные зависимости ε , ε^{-1} и q на частоте 1 кГц

О влиянии альбумина яичного белка на морфотропные переходы карбоната кальция при его осаждении из водных растворов

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

¹ *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва,
Российская Федерация
e-mail: zakharov@igic.ras.ru*

² *НИТУ «МИСиС», Москва, Российская Федерация*

³ *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина, РАН, Москва,
Российская Федерация*

⁴ *Российский университет транспорта «МИИТ», Москва, Российская Федерация*

Актуальными являются исследования, связанные с синтезом перспективных для применения в медицинской практике материалов на основе карбоната кальция (CaCO_3 , КК). Среди известных полиморфных модификаций карбоната кальция (кристаллических безводных – кальцит, арагонит, ватерит; гидратированных – моно- ($\text{CaCO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$) и гексагидрат- ($\text{CaCO}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$); аморфной фазы КК) наибольший интерес для использования в качестве материалов таргетированной доставки лекарственных препаратов представляет ватерит. Приведены результаты моделирования биоминерализации карбоната кальция с участием альбумина яичного белка (АЛБ) в условиях осаждения из водных растворов в водной системе $\text{CaCl}_2\text{-Na}_2\text{CO}_3\text{-АЛБ-H}_2\text{O}$ и проведена оценка влияния содержания АЛБ в растворе на образование в составе продуктов синтеза фаз кальцита (К), арагонита (А) и ватерита (В). Продукты синтеза идентифицированы методами физико-химического анализа (химического, рентгенофазового, колебательной спектроскопии, электронной сканирующей и просвечивающей микроскопии) и установлены фундаментальные взаимосвязи состав – условия синтеза – структура – дисперсность – свойства для полученных продуктов синтеза. Обсуждены разработанные и реализованные подходы для направленного синтеза материалов с регулируемыми в ходе синтеза и последующей обработки свойствами на основе КК медицинского назначения и варианты использования в медицинской практике синтезированных материалов.

В природе КК имеет шесть известных кристаллических полиморфных модификаций, три из которых являются безводными кристаллами (кальцит, арагонит и ватерит) (табл. 1), две - гидратированными фазами КК (моно- и гексагидрат КК: $\text{CaCO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{CaCO}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) и одна - является гидратированной аморфной (аморфный КК (АКК)) [1].

КК известен как дешевый доступный коммерческий материал [2]. Он широко используется для различных промышленных применений [3]. Внимание к изучению особенностей кристаллизации КК вызвано широко

распространенными природными процессами кальцификации и биоминерализации: от бактерий до млекопитающих [4]. Биоминералы типа органика/неорганика, являющиеся биокompозитами различного типа, включают большую группу биологических объектов [5]. Среди биологических минералов КК занимает особое место, поскольку он входит в состав костей и панцирей животных. При этом неорганический материал (КК) оказывается связанным с биополимерами [6].

Таблица 1. Кристаллографические характеристики безводных полиморфных модификаций КК.

	Кальцит	Арагонит	Ватерит
Кристаллическая структура	Тригональная	Орторомбическая	Гексагональная
Пространственная группа	$R\bar{3}2/c$	$Pm\bar{c}n$	$P6_3/mmc$
Параметры решетки	$a = b = 4.990 \text{ \AA}$ $c = 17.061 \text{ \AA}$	$a = 4.9598 \text{ \AA}$ $b = 7.9641 \text{ \AA}$ $c = 5.7379 \text{ \AA}$	$a = b = 7.16 \text{ \AA}$ $c = 2.547 \text{ \AA}$

На образование определенной полиморфной модификации КК, происходящее в ходе осаждения из водных растворов кристаллов КК, способны оказывать влияние такие условия синтеза, как тип прекурсоров, характер их взаимодействия в ходе синтеза, а также внешние воздействия – температура, давление, скорости перемешивания и потока газа (CO_2) в растворе. Оценка влияния органических добавок на образование КК из водных растворов перспективно в том отношении, что оно, как известно [6], эффективно для управления фазовым составом продуктов синтеза.

Синтез КК проводили при 20°C путем сливания растворов Na_2CO_3 и CaCl_2 с последующим перемешиванием смеси. Добавление АЛБ осуществляли по каплям его водного раствора в количестве, соответствующем получению продуктов синтезе, содержащих 4,9%, 9,8% и 19,6% масс. % АЛБ. Полученную смесь отстаивали и отфильтровывали образовавшийся в осадке продукт синтеза.

Идентификацию образцов проводили с использованием методов химического и рентгенофазового анализов (РФА), инфракрасной спектроскопии (ИК), сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии (СЭМ, ПЭМ).

Об образовании мелкокристаллического КК свидетельствуют результаты химического и РФА анализов, ИКС.

Количество вводимого в ходе синтеза АЛБ оказывает существенное влияние на фазовый состав продуктов синтеза (рис. 1, а). Как видно,

содержание наиболее растворимой и наименее устойчивой фазы ватерита имеет место при наибольшем содержании АЛБ в ходе синтеза.

При этом размеры кристаллов ватерита (рис. 1, б) в меньшей степени подвержены влиянию содержания АЛБ при синтезе.

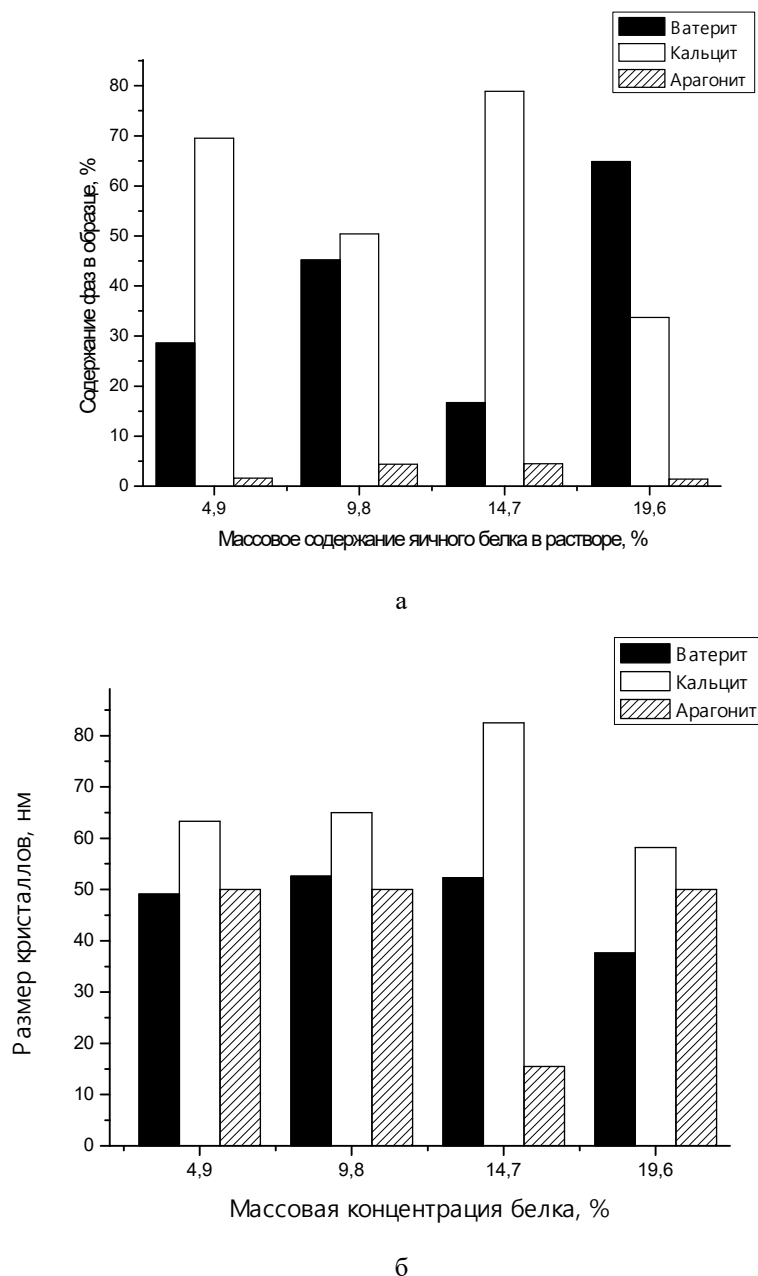


Рисунок 1. Содержание различных фаз (а) и размеры кристаллов (б) образцов, синтезированных при 20 °С мгновенным сливанием растворов хлорида кальция и карбоната натрия и прикапыванием растворов яичного альбумина различных концентраций.

Результаты электронной (СЭМ, ПЭМ) микроскопии (рис. 2 а, б) подтверждают данные рентгеновской дифрактометрии и ИК спектроскопии

и свидетельствуют о том, что микрокристаллы КК (рис. 2 а) образованы сростками нанокристаллов КК меньших размеров (рис. 2 б).

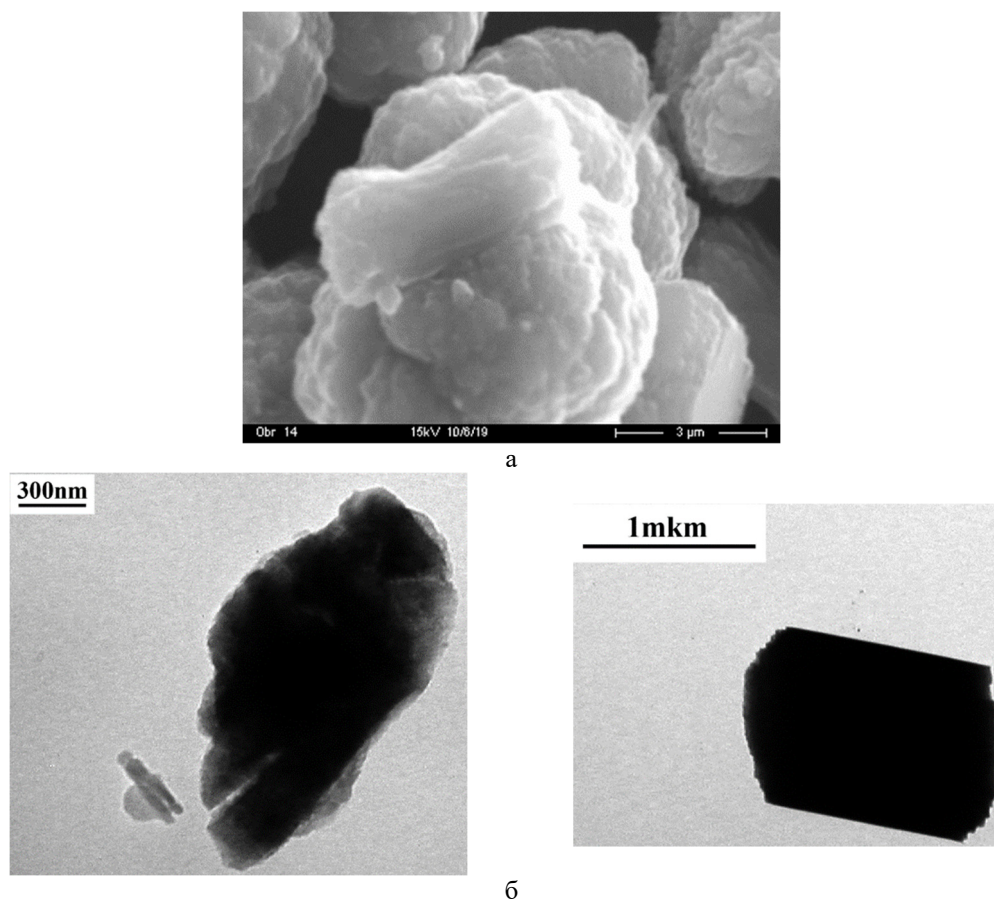


Рисунок 2. Результаты СЭМ и ПЭМ образцов, синтезированных с содержанием 4.9 масс. % АЛБ.

Представленные результаты будут способствовать разработке методов направленного синтеза КК в ходе осаждения из водных растворов с регулируемыми параметрами содержания различных фаз частиц различных размеров и определенной морфологии в продуктах синтеза;

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

- [1] J. Kawano, N. Shimobayashi, M. Kitamura at al., Journal of Crystal Growth. **237**, 419 (2002).
- [2] Y. Wang, Y.X. Moo, C. Chen, at al., J. Colloid Interf. Sci. **352**, 393 (2010).
- [3] L. Xiang, Y. Xiang, Y. Wen, at al., Materials Letters. **58**, 959 (2004).
- [4] S. Mann Biomaterialization principles and concepts in bioinorganic materials chemistry, Oxford University Press (2001).
- [5] E. Dujardin, S. Mann, Advanced Materials. **14**, (11), 1 (2002)
- [6] K.G. Hunter, Current Opinion Solid State & Materials Sci. **1**. 430 (1996).

Исследование электрических свойств материалов системы Cu-Ge-As-Se

Щетников О.П., Бабушкин А.Н.

Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия

e-mail: oleg.shchetnikov@urfu.ru

Важнейшей задачей материаловедения является получение соединений с заданными свойствами. Многокомпонентные халькогениды меди входят в класс суперионных проводников и представляют интерес в связи со сложным электронно-ионным переносом, оказывающим влияние на электрические характеристики. В настоящее время наблюдается повышенный интерес к системам с гомологическими рядами слоистых соединений, имеющих сложные кристаллические решетки и высокую концентрацию носителей заряда. Подобные материалы находят широкое применение в оптоэлектронике [1], при создании резистивных ячеек памяти [2], фотонных устройств с тонкопленочной структурой [3], фотоэлектрических устройств [4] и пр.

Импедансная спектроскопия позволяет определить вклады различных элементов структуры (проводимость объема зерна, его поверхности и межкристаллитной границы). В настоящей работе представлены результаты исследования полного комплексного сопротивления халькогенидов меди со структурной формулой $(\text{GeSe})_{1-x}(\text{CuAsSe}_2)_x$ при концентрациях $0,1 \leq x \leq 0,9$ в диапазоне температур $300 \div 445$ К. Синтез, состав исследуемых образцов, а также параметры кристаллических решеток подробно описаны в работе [5]. Изучение электрических свойств в диапазоне частот 1 Гц – 32 МГц проводилось на измерителе Modulelab Solartron System, в состав которого входит многофункциональная ячейка Probostat и импедансометр Solartron 1260A. Обработка годографов импеданса произведена с помощью программного комплекса ZView (Scribner Association), позволяющем сопоставить экспериментальным данным наиболее точную эквивалентную схему, а также оценить величину ее параметров.

Обнаружено, что годографы импеданса образцов при концентрациях $0,1 \leq x \leq 0,3$ представляют собой полуокружности, центры которых, в основном, лежат ниже оси абсцисс, что связывается с эффектами на границах зерен. В высокочастотной области (свыше 1,09 МГц) обнаруживается дополнительная высокочастотная фаза, которая также аппроксимируется дугой полуокружности. Емкость границ зерен материалов при данных

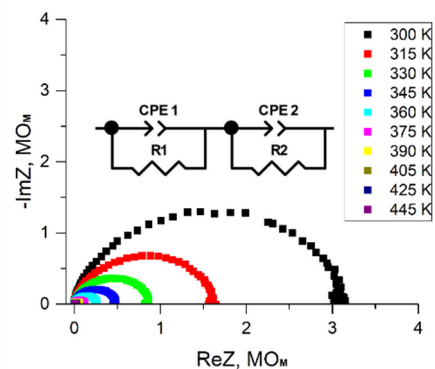


Рис. 1 Годограф импеданса и соответствующая эквивалентная схема для $(\text{GeSe})_{1-x}(\text{CuAsSe}_2)_x$ при $x = 0,1$ в диапазоне температур 300 – 445 К.

концентрациях x превышает емкость их объема. Данную особенность подтверждает тот факт, что при уменьшении частоты переменного тока при регистрации спектра импеданса для полупроводникового материала сначала наблюдаются элементы, отвечающие объему, а затем границам зерен. При этом отрицательная величина реактивной составляющей импеданса свидетельствует о том, что ток по фазе опережает напряжение.

В образцах с концентрациями $0,4 \leq x \leq 0,9$ при воздействии периодически изменяющихся электрических полей соответствующие вариации скорости носителей заряда отстают по фазе от изменений напряженности электрического поля и, как следствие, реактивная составляющая импеданса образцов переходит из отрицательной области значений в положительную. В структуре эквивалентных схем это проявляется аналогично наличию индуктивности.

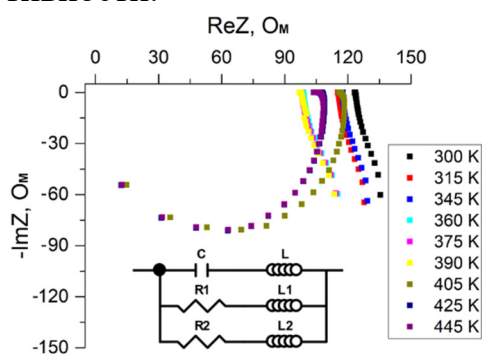


Рис. 2 Годограф импеданса и соответствующая эквивалентная схема для $(\text{GeSe})_{1-x}(\text{CuAsSe}_2)_x$ при $x = 0,6$ в диапазоне температур 300 – 445 К.

Интересная особенность наблюдается для образца с концентрацией $x = 0,6$. При $300 \leq T \leq 400$ К годограф имеет вид кривой, сдвигающейся в сторону увеличения действительной части импеданса при увеличении частоты переменного тока. При температурах свыше 405 К годограф приобретает вид перевернутой полуокружности, с увеличением $\text{Re}Z$ на 20 % (по сравнению с $T = 390$ К). При этом удельная электропроводность данной концентрации монотонно убывает в диапазоне $T = 300 - 425$ К, что характерно для металлов ввиду увеличения

тепловых колебаний решетки, препятствующих свободному перемещению носителей заряда и приводящее к повышению хаотического движения носителей заряда, а при температурах свыше 425 К начинает возрастать, что характерно для полупроводников. В работе [6] схожая аномалия проводимости в соединении CuGeAsSe_3 (в области гомогенности которого лежат концентрации $0,4 \leq x \leq 0,7$) связывается с фазовым переходом, имеющим место при данных температурах. Именно при концентрации $x = 0,6$ среди материалов системы Cu-Ge-As-Se наблюдается наименьшая теплопроводность и наибольшая термоэлектрическая добротность [7].

- [1] A.D.Priscilla, J.J.Buckley, R.L.Brutchey, *Nanoscale* **6**, 2399 (2011).
- [2] B. Dennis, C. Schindler, U. Bottger, *Thin Solid Films* **6**, 1223 (2008).
- [3] S. Parikshit, V. S. Rangra, P. Sharma, *J. Phys. D: Appl. Phys* **41**, 22 (2008).
- [4] K. Carsten, R. Rosezin, E. Linn, *Appl. Phys. A* **102**, 791 (2011).
- [5] Н.В. Мельникова, Л.Я. Кобелев, В.Б. Злоказов, *ПЖТФ* **21**, 1 (1995).
- [6] Мельникова Н.В. Электронная и ионная проводимость CuGeAsS_3 и CuGeAsSe_3 : Дисс. на соиск. уч. ст. канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Н.В. Мельникова. Екатеринбург, 1993. - 229 с.
- [7] О.П. Щетников, Н.В. Мельникова, А.Н. Бабушкин, *ЖТФ* **91**, 1 (2020).

Структурный фазовый переход в Cu_2Se при высокой температуре

Дашдемиров А.О.

*Азербайджанский государственный педагогический университет, Баку, Азербайджан
e-mail: dashdamirovarzu@gmail.com*

Широко изучаются халькогенидные материалы с полупроводниковыми и сегнетоэлектрическими свойствами. Основной причиной этого является их использование в современной электронике. Известно, что ширина запрещенной зоны меняется в зависимости от химических элементов в этих соединениях. Потому, что по мере изменения атомов в элементарной ячейке меняется и электронная структура. Поэтому важно изучать электронную и кристаллическую структуру халькогенидных полупроводников. В последнее время в результате разработки программ появилась возможность теоретически и экспериментально рассчитывать структурные свойства полупроводников [1,2].

Важно изучить фазовые переходы, происходящие в халькогенидах. Потому, что при некоторых структурных превращениях происходит изменение физических свойств материалов. В халькогенидах наблюдаются фазовые переходы полупроводник-металл и полупроводник-полуметалл. В это время изменяются свойства материала и рабочий диапазон. Изучение фазовых переходов также важно для теоретического изучения этих соединений. Потому, что модель, построенная для исследуемого соединения, также позволяет прогнозировать структурные свойства подобных соединений. Поэтому структурные фазовые переходы халькогенидов изучают при высоких давлениях и высоких температурах [3].

При анализе результатов, полученных в ходе предыдущих исследований, было установлено, что соединение Cu_2Se представляет собой достаточно сложную систему. Его кристаллическая структура варьируется в зависимости от метода синтеза. Поэтому важно синтезировать это соединение и изучить его новые модификации. Хотя оптические, электрические и др. свойства этого соединения изучены, теплофизические свойства изучены недостаточно [4]. В настоящей работе соединение Cu_2Se было синтезировано в условиях вакуума при высоких температурах, изучена кристаллическая структура и структурно-фазовые переходы полученного кристалла. Структурные исследования проводились методом рентгеновских дифракции при высоких температурах.

После завершения процесса синтеза был проведен структурно-фазовый анализ поликристаллов Cu_2Se методом РФА. Метод РФА является уникальным методом изучения кристаллической структуры соединений [5]. Фазовые переходы полученной фазовой системы исследованы методом рентгеновской дифракции при высоких температурах. Поликристаллы

вышеуказанных составов исследовали на дифрактометре ДРОН-3М (Cu K α - излучение, $\lambda_{\alpha} = 1.5418 \text{ \AA}$, Ni-фильтр) с высокотемпературной приставкой УРВТ-2000, обеспечивающей вакуум 10^{-2} Па, угловое разрешение регистрации составляет $\sim 0.1^{\circ}$, погрешность определения углов отражения не превышает $\Delta\theta = \pm 0.02^{\circ}$.

От кристаллов при комнатной температуре в диапазоне углов $15^{\circ} \leq 2\theta \leq 80^{\circ}$ зарегистрировано шесть четких дифракционных пиков с индексами (001), (022), (027), (040), (055) и (0.0.18). Эта ориентация кристалла наблюдалась в интервале температур $T = 290\text{-}573 \text{ К}$. Выше 423 К исчезают все дифракционные рефлексы, относящиеся к низкотемпературной орторомбической модификации, и дифракционные рефлексы с индексами (111), (222) и (333), принадлежащие к высокотемпературной кубической модификации, фиксируются в том же диапазоне углов. Установлено, что равновесная температура между модификациями составляет $T = 407 \text{ К}$.

Установлено, что кристаллическая структура Cu_2Se соответствует орторомбической сингонии с пространственной группой $P222_1$. Значения параметров ячейки: $a = 4.1168 \text{ \AA}$, $b = 7.0322 \text{ \AA}$, $c = 20.3472 \text{ \AA}$. При $T = 407 \text{ К}$ обнаружен фазовый переход в кубическую форму. Определено, что параметры ячейки кубической фазы $F-43m$ составляют: $a = 5.855 \text{ \AA}$. Получены температурные зависимости параметров ячеек для кубической и орторомбической фаз. Рассчитаны коэффициенты термического расширения и изучены структурные аспекты тепловых свойств Cu_2Se . Определение коэффициента теплового расширения позволяет определить и другие термодинамические функции материалов.

- [1] Y.I.Aliyev, N.A.Ismayilova, R.F.Novruzov, A.O.Dashdamirov, H.J.Huseynov, S.H.Jabarov, A.A.Ayubov, *Modern Physics Letters B* **33**, 1950242 (2019).
- [2] N.A.Ismayilova, S.H.Jabarov, *Optoelectronics and Advanced Materials-Rapid Communications* **11**, 353 (2017).
- [3] S.H.Jabarov, V.B.Aliyeva, T.G.Mammadov, A.I.Mammadov, S.E.Kichanov, L.S.Dubrovinsky, S.S.Babayev, E.G.Pashayeva, N.T.Dang, *Materials Science-Poland* **36**, 203 (2018).
- [4] F.El Akkad, B.Mansour, T.Hendeya, *Materials Research Bulletin* **16**, 535 (1981).
- [5] A.S.Abiyev, *Advanced Physical Research* **3**, 137 (2021).

Получение и кристаллическая структура соединения Cu_2NiSeTe

Гулиева Х.М.¹, Мурсакулов Н.Н.¹, Ибрагимова С.И.¹, Алыев Ю.И.^{2,3}

¹*Институт Физики Министерства Науки и Образования,
Баку, Азербайджан*

²*Азербайджанский государственный педагогический университет,
Баку, Азербайджан*

³*Западно-Каспийский университет, Баку, Азербайджан
e-mail: q.xeyale84mail.ru*

Введения: Халькогенидные полупроводники широко используются в современной электронике. Основная причина этого в том, что они имеют разные функциональные свойства [1-5]. Более интересные физические свойства можно наблюдать, когда в эти материалы в качестве примесей вводят атомы металлов с магнитными свойствами.

Соединение Cu_3SeTe занимает особое место среди халькогенидов. В результате рентгеноструктурных исследований установлено, что кристаллическая структура соединения Cu_3SeTe соответствует кубической симметрии с пространственной группой $R\bar{4}3m$.

Хотя кристаллическая структура и электрические свойства соединения Cu_3SeTe изучены, физико-химические процессы, происходящие в этом соединении при катион-катионных замещениях, изучены недостаточно. В настоящей работе синтезировано соединение Cu_2NiSeTe с частичными заменами $\text{Cu} \rightarrow \text{Ni}$ и проведено рентгенофазовое исследование.

Синтез образцов: Синтез соединения Cu_2NiSeTe осуществлялся в результате химической реакции в высокотемпературной печи в условиях вакуума по стандартной методике. Так, в однозонной печи элементы (Cu , Ni , Se , Te) по стехиометрическому составу собирали в кварцевую ампулу, откачивали воздух до 10-4 мм ртутного столбца, а устье ампулы запаивался. Ампулу постепенно вводили в печь, температура зоны которой сначала была стабилизирована на уровне 300 °С. После выдержки процесса на выбранном начальном режиме в течение 1 часа температуру печи постепенно повышали до 700 °С и стабилизировали на 0,5 часа при температурах 800, 900, 1000 °С в диапазоне 700-1050 °С, ампулу синтеза встряхивали с печью. После этого температуру повышали до 50°С и поддерживали в течение 1,5 часов. Затем температуру постепенно снижали до 600 °С и процесс останавливали, выдерживая при температуре гомогенизации в течение 3 сут. Проведен рентгенофазовый анализ полученного образца. Установлено, что синтезирован однофазный поликристалл. Фотография полученного образца представлена на рисунке 1.



Рис. 1. Фотоизображение образца $Cu_2NiSeTe$

Изучение

кристаллической структуры: Существуют различные методы изучения кристаллической структуры этих материалов. Фазовый анализ соединения $Cu_2NiSeTe$ выполнен рентгеноструктурным методом. Исследования проводились на дифрактометре D8 ADVANCE. Параметры данного дифрактометра: 40 кВ, 40 мА, $CuK\alpha$ -излучение, $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$. Поликристаллический образец, показанный на рис. 1, был измельчен и приведен в состояние порошка, а затем изучена его кристаллическая структура. Спектр рентгеновской дифракции, полученный при комнатной температуре, анализировали по методу Ритвельда. При анализе использовалась программа Fullprof. Спектр, полученный в диапазоне углов дифракции $25^\circ \leq 2\theta \leq 70^\circ$ при комнатной температуре, представлен на рис. 2.

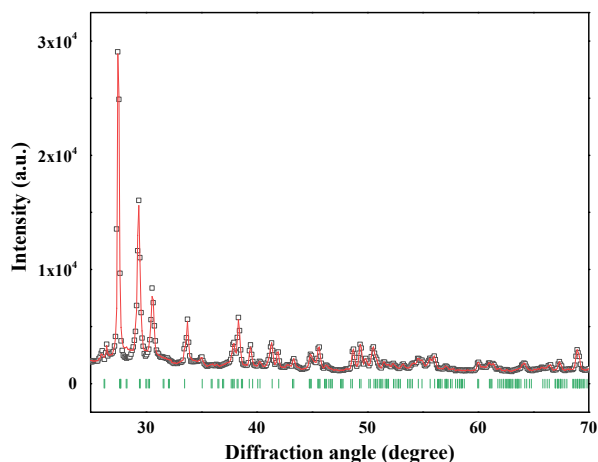


Рис. 2. Рентгенодифракционный спектр соединения $Cu_2NiSeTe$. Черными точками показаны экспериментальные результаты, красными линиями — результаты расчетов, зелеными линиями — плоскости дифракции

Установлено, что кристаллическая структура полученного халькогенидного соединения $Cu_2NiSeTe$ является высокосимметричной. Хотя химическая формула этого соединения сложна, оно может кристаллизоваться в одной фазе. Спектр, представленный на рис. 2, анализировали методом Ритвельда и определяли кристаллографические параметры. Параметры решетки гексагонального сингониума оказались

равными $a = b = 3,9316(6) \text{ \AA}$, $c = 17,1316(4) \text{ \AA}$. Пространственная группа $R\bar{6}3/mmc$. Как видно, атомы Ni могут полностью замещать атомов Си в кристаллической решетке. Соответственно атомы Se также замещают атомов Те. Поэтому формируется однофазная гексагональная кристаллическая структура.

Список литературы

- [1] Ш.М. Гасанли, Н.Н. Мурсакулов, У.Ф. Самедова, Н.Н. Абдул-заде, Б.А. Мамедов, Р.К. Гусейнов, Физика и техника полупроводников, **44**, **7**, (2010).
- [2] Y.I. Aliyev, Y.G. Asadov, T.M. Ilyasli, F.M. Mammadov, T.G. Naghiyev, Z.A. Ismayilova, M.N. Mirzayev, S.H. Jabarov, Modern Physics Letters B, **34** (**05**), (2020).
- [3] N. Makhmudova, T. Piyasly, S. Mammadov, R. Abbasova, New Materials, Compounds and Applications, **6**, **1**, (2022).
- [4] Ю.И. Алыев, Ю.Г. Асадов, Р.Д. Алыева, С.Г. Джабаров, Физика и техника полупроводников, **51**, **6**, (2017).
- [5] S.R. Azimova, Advanced Physical Research, **3**, **1**, (2021).

Фазовые переходы в $\text{Na}_3\text{Gd}_{1-x}\text{Eu}_x(\text{PO}_4)_2$ со структурой $\beta\text{-K}_2\text{SO}_4$

Дихтяр Ю.Ю.¹, Морозов В.А.¹, Посохова С.М.¹, Спасский Д.А.²

¹ Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
e-mail: yurydikhtyar@gmail.com

² Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
e-mail: daspassky@gmail.com

Соединения с общей формулой $\text{Na}_3\text{Ln}(\text{PO}_4)_2$ (NLPO) привлекают внимание исследователей благодаря своим высоким люминесцентным характеристикам [1-3]. Однако, их строение до сих пор остается не вполне понятным, как и наличие фазовых переходов. *Vlasse* с соавторами [4] относили соединения NLPO с $\text{Ln}^{3+} = \text{La} - \text{Eu}$ и пространственной группой (ПГ) $Pca2_1$ к структурному типу арканита ($\beta\text{-K}_2\text{SO}_4$) с, тогда как для $\text{Ln}^{3+} = \text{Gd} - \text{Er}$ с ПГ $C2/c$ к структурному типу глазерита ($\text{K}_3\text{Na}(\text{SO}_4)_2$). В более поздних исследованиях в случае орторомбических фаз $\text{Ln}^{3+} = \text{La}$ [5], Pr [6], Sm [7] при уточнении структур по монокристалльным данным использовался $(3+n)$ -мерный формализм с супер-ПГ ($Pca2_1(0\beta 0)000$) и вектором модуляции \mathbf{q} [8]. При этом происходит переход от аперриодической, в случае La ($\mathbf{q} = 0.387\mathbf{b}^*$), структуры к соразмерно-модулированной для Sm и Pr ($\mathbf{q} = 1/3\mathbf{b}^*$). Целью данной работы являлось выявление возможности кристаллизации твердых растворов $\text{Na}_3\text{Gd}_{1-x}\text{Eu}_x(\text{PO}_4)_2$ (NGEPO), существования фазовых переходов и особенностей строения в зависимости от элементного состава.

Соединения NGEPO получены твердофазным синтезом при температуре 1373 К с различными условиями охлаждения: медленным до комнатной температуры и закаливанием в температуру жидкого азота. Установлено влияние условий охлаждения на образование и структуру фаз NGEPO. В случае медленного охлаждения не образуется непрерывного ряда твердых растворов NGEPO, несмотря на то, что в соответствии с результатами уточнения структур по данным синхротронного эксперимента $\text{Na}_3\text{Eu}(\text{PO}_4)_2$ (ПГ $Pca2_1$) и $\text{Na}_3\text{Gd}(\text{PO}_4)_2$ (ПГ $C2/c$) кристаллизуются в разных сингониях, но принадлежат к одному структурному типу арканита. Введение уже небольшого количества Gd^{3+} к $\text{Na}_3\text{Eu}(\text{PO}_4)_2$ или Eu^{3+} к $\text{Na}_3\text{Gd}(\text{PO}_4)_2$ приводит к получению смеси двух фаз.

Методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) установлено, что в $\text{Na}_3\text{Gd}(\text{PO}_4)_2$ наблюдается обратимый фазовый переход первого рода при температуре 1137 К. Закаливание образцов в температуру жидкого азота привело к образованию непрерывного ряда твердых растворов NGEPO с ПГ $Pca2_1$ (α -фаз).

Уточнение параметров элементарных ячеек NGEPO по методу ЛеБэля после закаливания провели как в ПГ $Pca2_1$ так и в супер-ПГ $Pca2_1(0\beta 0)000$ с изменением вектора модуляции \mathbf{q} от $0.3561\mathbf{b}^*$ (образцы с большим

содержанием Gd) до $1/3\mathbf{b}^*$ (образцы с большим содержанием Eu). Установлено, что применение формализма супер-ПГ позволяет получить лучшее уточнение экспериментальных данных. Зависимость изменения параметров от концентрации Eu носит нелинейный характер. Структуры $\text{Na}_3\text{Eu}(\text{PO}_4)_2$, $\alpha\text{-Na}_3\text{Gd}(\text{PO}_4)_2$ и $\alpha\text{-Na}_3\text{Gd}_{0.5}\text{Eu}_{0.5}(\text{PO}_4)_2$ уточнены в супер-ПГ $Pca2_1(0\beta 0)000$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект № 22-23-00552).

- [1] R. Salmon, C. Parent, M. Vlasse, and G. Le Flem, “The crystal structure of a new high -Nd- concentration laser material: $\text{Na}_3\text{Nd}(\text{PO}_4)_2$,” *Mater Res Bull*, vol. 13, no. 5, pp. 439–444, May 1978, doi: 10.1016/0025-5408(78)90151-4.
- [2] M. Fang, W.-D. Cheng, H. Zhang, D. Zhao, W.-L. Zhang, and S.-L. Yang, “A sodium gadolinium phosphate with two different types of tunnel structure: Synthesis, crystal structure, and optical properties of $\text{Na}_3\text{GdP}_2\text{O}_8$,” *J Solid State Chem*, vol. 181, no. 9, pp. 2165–2170, Sep. 2008, doi: 10.1016/j.jssc.2008.04.013.
- [3] C.-K. Nie, D. Zhao, P.-G. Duan, Y.-C. Fan, L. Zhang, and R.-J. Zhang, “Structure twinning and photoluminescence properties of sodium dysprosium phosphate $\text{Na}_3\text{Dy}(\text{PO}_4)_2$,” *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 29, no. 2, pp. 1664–1671, Jan. 2018, doi: 10.1007/s10854-017-8079-8.
- [4] M. Vlasse, C. Parent, R. Salmon, G. Le Flem, and P. Hagemmuller, “The structures of the $\text{Na}_3\text{Ln}(\text{XO}_4)_2$ phases (Ln = rare earth, X = P, V, As),” *J Solid State Chem*, vol. 35, no. 3, pp. 318–324, Dec. 1980, doi: 10.1016/0022-4596(80)90528-9.
- [5] D. Zhao *et al.*, “Four-Dimensional Incommensurate Modulation and Luminescent Properties of Host Material $\text{Na}_3\text{La}(\text{PO}_4)_2$,” *Inorg Chem*, vol. 56, no. 4, pp. 1835–1845, Feb. 2017, doi: 10.1021/acs.inorgchem.6b02241.
- [6] D. Zhao, F.-X. Ma, P.-G. Duan, C.-K. Nie, J.-F. Guo, and R.-J. Zhang, “Commensurately modulated structure and luminescent properties of $\text{Na}_3\text{Pr}(\text{PO}_4)_2$,” *J Lumin*, vol. 192, pp. 129–135, Dec. 2017, doi: 10.1016/j.jlumin.2017.06.044.
- [7] R.-J. Zhang, D. Zhao, Q. Zhong, Y.-L. Xue, and G.-X. Huang, “ $\text{Na}_3\text{Sm}(\text{PO}_4)_2$: (3+1)-dimensional commensurately modulated structure model and photoluminescence properties,” *Z Kristallogr Cryst Mater*, vol. 234, no. 5, pp. 281–289, May 2019, doi: 10.1515/zkri-2018-2095.
- [8] H. T. Stokes, B. J. Campbell, and S. van Smaalen, “Generation of (3+d)-dimensional superspace groups for describing the symmetry of modulated crystalline structures,” *Acta Crystallogr A*, vol. 67, no. 1, pp. 45–55, Jan. 2011, doi: 10.1107/S0108767310042297.

Структура и атомная динамика соединения $Ga_{0.5}In_{1.5}Se_3$

Ибрагимова С.И., Джабаров С.Г., Гулиева Х.М.

*Институт Физики Министерства Науки и Образования Азербайджанской Республики,
Баку, Азербайджан
seva-ahmed@mail.ru*

Соединения Ga_2Se_3 и In_2Se_3 считаются наиболее изученными среди бинарных полупроводниковых халькогенидов. На основе этих соединений получение новых соединений и изучение их различных физических особенностей позволяют наблюдать в этих материалах новые функциональные свойства [1, 2]. Синтезировано соединение $Ga_{0.5}In_{1.5}Se_3$ с катион-катионными замещениями в указанных полупроводниковых халькогенидах, изучены его структурные свойства и атомная динамика. Структурные исследования проводились рентгеновской дифракции методом при комнатной температуре и в нормальных условиях. Для изучения влияния частичных замещений $In \rightarrow Ga$ на атомную динамику кристаллической структуры были также проведены исследования спектроскопии комбинационного рассеяния.

Структурные исследования соединения $Ga_{0.5}In_{1.5}Se_3$. С целью исследования структурных аспектов в халькогенидных полупроводниковых соединениях необходимо изучить кристаллическую структуру композиции, полученной в результате проведения частичных замещений в этих соединениях. Для этого путем частичного замещения атомов индия атомами галлия было синтезировано бинарное полупроводниковое соединение $Ga_{0.5}In_{1.5}Se_3$ и изучена кристаллическая структура его исследуемых порошка образных образцов. Кристаллическую структуру изучали методом рентгеновской дифракции. Полученный спектр рентгеновской дифракции представлен на рисунке 1.

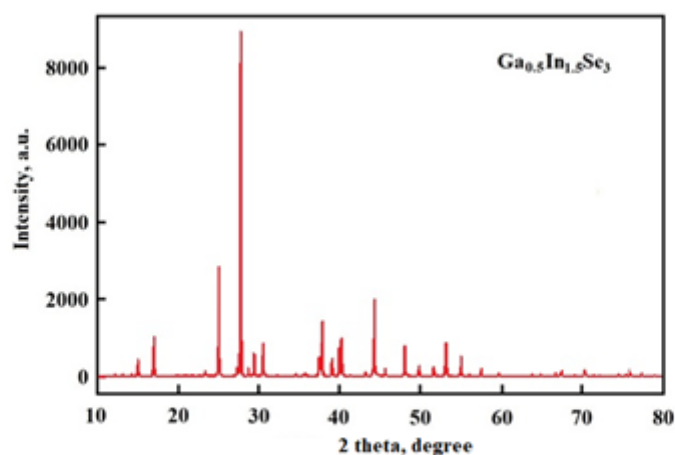


Рис. 1. Спектр рентгеновской дифракции соединения $Ga_{0.5}In_{1.5}Se_3$.

При анализе рентгеновского спектра соединения $\text{Ga}_{0,5}\text{In}_{1,5}\text{Se}_3$, полученного в диапазоне углов дифракции $10^\circ \geq 2\theta \geq 80^\circ$, установлено, что кристаллическая структура этого соединения соответствует гексагональной сингонии и пространству группы $R\bar{6}_1$. Значения параметров решетки: $a = b = 7,0513\text{\AA}$, $c = 19,1482\text{\AA}$ [3,4].

Атомная динамика соединения $\text{Ga}_{0,5}\text{In}_{1,5}\text{Se}_3$. Для изучения влияния частичных замещений $\text{In} \rightarrow \text{Ga}$ на атомную динамику кристаллической структуры атомная динамика соединения $\text{Ga}_{0,5}\text{In}_{1,5}\text{Se}_3$ была исследована методом рамановской спектроскопии. Полученный спектр комбинационного рассеяния представлен на рисунке 2.

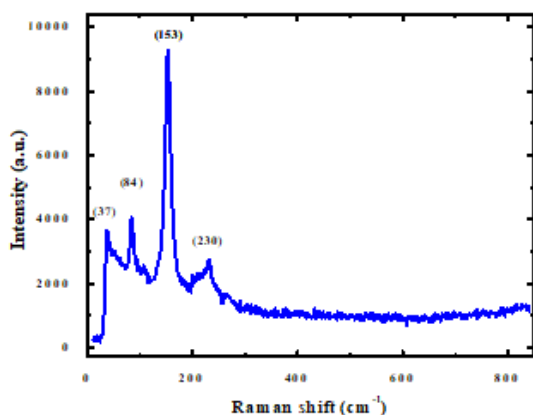


Рис.2. Спектр КР соединения $\text{Ga}_{0,5}\text{In}_{1,5}\text{Se}_3$.

В спектре, полученном в диапазоне частот $\nu = 0 - 800 \text{ см}^{-1}$, наблюдались 4 основные моды колебаний: $\nu_1 = 37 \text{ см}^{-1}$, $\nu_2 = 84 \text{ см}^{-1}$, $\nu_3 = 153 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_4 = 230 \text{ см}^{-1}$. В результате проведенного выше анализа было установлено, что моды колебаний, наблюдаемые в соединении $\text{Ga}_{0,5}\text{In}_{1,5}\text{Se}_3$, соответствуют частотам колебаний связей Ga–Se [5].

При спектроскопии комбинационного рассеяния соединения In_2Se_3 наблюдались моды колебаний, полученные на более низких частотах [6]. В исследуемом соединении $\text{Ga}_{0,5}\text{In}_{1,5}\text{Se}_3$ полиэдры, образующиеся при ковалентных связях атомов In с атомами Se, имеют форму бипирамид. Частоты колебаний бипирамид InSe_5 составляют: $\nu_1 = 37 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_2 = 84 \text{ см}^{-1}$. Когда атомы Ga участвуют в этих связях, межатомные расстояния уменьшаются, и в это время многогранники становятся тетраэдрами. Частоты колебаний бипирамид $\text{In}(\text{Ga})\text{Se}_4$ составляют: $\nu_3 = 153 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_4 = 230 \text{ см}^{-1}$.

- [1] H. Hahn, W. Klingler, Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie, **260**, (1949).
- [2] M. Souilah, A. Lafond, C. Guillot-Deudon [et.al], Journal of Solid State Chemistry, **183**, (2010).
- [3] S.I. Ibragimova, S.H. Jabarov, Y.I. Aliyev N.T. Dang, Modern Physics Letters B, **36, 05**, (2022).
- [4] S. İbrahimova, İ. Əsgərzadə, Q. Hüseyinov, II international Ankara conference of scientific research, March 6-8, Ankara: (2020).
- [5] M. Isika, I. Guler, N.M. Gasanly, Optical Materials, **95**, (2019).
- [6] R. Lewandowska, R. Bacewicz, J. Filipowicz [et. al], Materials Research Bulletin, **36**, (2001).

Структурные и люминесцентные особенности $K_5La_{1-x}Er_x(MoO_4)_4$ со структурой пальмиерита

Посохова С.М.¹, Морозов В.А.¹, Болдырев К.Н.²,
Дихтяр Ю.Ю.¹, Лазорьяк Б.И.¹

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

² Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

e-mail: posohovasm@gmail.com

Двойные молибдаты $K_5R(MoO_4)_4$ ($R = PЗЭ$) вызывают широкий интерес из-за их эффективной химической/термической стабильности, разнообразия структур и способности сочетать различные редкоземельные активаторы (R) в одной матрице для достижения эффективной люминесценции [1]. Люминофоры, излучающие в ИК-диапазоне, представляют широкий научный интерес. Они используются для создания скрытых изображений, маркеров, в качестве фотопреобразователей излучения, например в солнечных элементах [2]. Катион Er^{3+} является одним из наиболее популярных и эффективных ионов, используемых в ап-конверсионных фосфорах, ИК-детекторах, в качестве флуоресцентных меток детекции биомолекул [3]. В спектрах люминесценции Er^{3+} наблюдается характерная полоса в области 1550 нм [4]. Практический интерес излучения в данном диапазоне обусловлен применением в большинстве современных оптических линий передачи информации на длине волны 1550 нм.

Двойные молибдаты $K_5R(MoO_4)_4$ ($R =$ редкоземельные элементы ($PЗЭ$), Bi , Y) составляют изоструктурный ряд и построены на основе структуры пальмиерита ($K_2Pb(SO_4)_2$, пр. гр. $R\bar{3}m$, $z = 3$). Кристаллохимическую формулу соединений $K_5R(MoO_4)_4$ можно представить как $M1^{[6+6]}K2_2^{[9+1]}(MoO_4)_2$ ($M1 = K_{0.5}R_{0.5}$). Возможность вращения тетраэдров MoO_4 в пальмиеритоподобных структурах, лабильность атомов кислорода и возможность как статистического, так и упорядоченного заселения позиции $M1$ пальмиерита катионами K^+ и R^{3+} приводят к тому, что большинство молибдатов $K_5R(MoO_4)_4$ характеризуются наличием нескольких полиморфных модификаций. Уменьшение радиуса $PЗЭ$ приводит к последовательному понижению координационных чисел для R^{3+} , координация которых может варьироваться в пределах $KЧ = 6-12$. Большая гибкость и устойчивость структурного мотива пальмиерита, который путем различных деформаций приспособляется к разным сочетаниям катионов, обуславливает эффективное применение данных матриц для создания люминофоров.

$K_5La_{1-x}Er_x(MoO_4)_4$ фазы ($x=0.05-1$) получены твердофазным методом синтеза при температуре 893 ± 10 К) и различных методах охлаждения: 1) медленным охлаждением до T_R и 2) закаливанием в жидкий азот из расплава. По данным рентгеновской дифракции установлено существование трех областей гомогенности, с увеличением концентрации Er^{3+} в $K_5La_{1-x}Er_x(MoO_4)_4$ происходит переход из $R\bar{3}m$ тригональной ($x=0.05$)

в $C2/c$ моноклинную ($x=1$) структуру через образование $C2/m$ моноклинной фазы ($x=0.75-0.95$). На границах областей гомогенности, согласно правилу фаз, существуют двухфазные области, для всего ряда. Закаленные в жидкий азот из расплава составы характеризуются пр.гр. $R\bar{3}m$ (НТ-фазы или α -фазы). Замещение, большего по размеру катиона La^{3+} ($r_{VIII} = 1.16 \text{ \AA}$) на катион Er^{3+} ($r_{VIII} = 1.00 \text{ \AA}$) в НТ- $K_5La_{1-x}Er_x(MoO_4)_4$ приводит к уменьшению объема ячейки (Рисунок 1а).

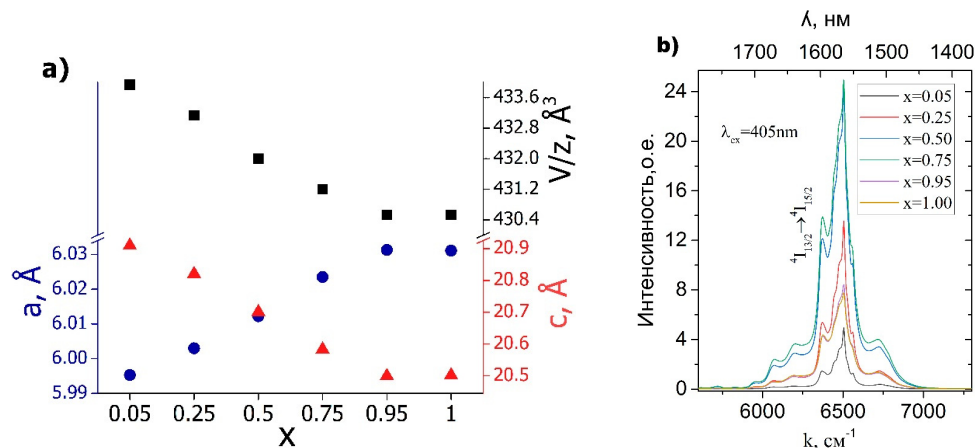


Рисунок 1. (а) Зависимость параметров a , c , V для закаленных твёрдых растворов α - $K_5La_{1-x}Er_x(MoO_4)_4$ ($x=0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.95, 1$) от концентрации Er^{3+} . (б) Спектры люминесценции при $\lambda_{ex}=405 \text{ nm}$ для α - $K_5La_{1-x}Er_x(MoO_4)_4$ снятые при комнатной температуре

Спектры фотолюминесценции в ближней ИК-области НТ- $K_5La_{1-x}Er_x(MoO_4)_4$ приведены на рис. 1б. Спектры измерены при 300 К и при возбуждении $\lambda_{ex} = 405 \text{ nm}$. В спектрах наблюдается широкая полоса эмиссионного перехода $^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ Er^{3+} в области 1450 — 1700 нм. При 300 К происходит расщепление и основного $^4I_{15/2}$, и возбужденного $^4I_{13/2}$ состояния на штарковские подуровни. Широкая полоса в спектрах люминесценции состоит из вкладов многих переходов между штарковскими подуровнями с близкой энергией основного и возбужденного состояний. При повышении концентрации Er^{3+} от 0.05 до 1, наблюдается постепенное увеличение интенсивности люминесценции, достигается максимум при 0.75, а затем происходит уменьшение интенсивности, что может быть связано с явлением концентрационного тушения.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 21-13-00102).

- [1] S.M. Posokhova, V.A. Morozov, D.V. Deyneko, I.V. Nikiforov, B. S. Redkin, D. A. Spassky, A. A. Belik, E. T. Pavlova, B. I. Lazoryak, Inorganic Chemistry, том 61, № 20, (2022).
- [2] M. Rai, K. Mishra, S. B. Rai, M. Paulramasamy, Mater. Res. Bull. Т. 105, (2018).
- [3] В.А. Трепаков, А.П. Скворцов, Z. Potucek, L. Jastrabik, A. Dejneka, Физика твердого тела, том 62, вып. 5, (2020).
- [4] У. А. Марьина, В. А. Воробьев, А. П. Марьин, Известия вузов. Материалы электронной техники. Т. 20, № 1, (2017).

Сложные фосфаты и ванадаты стронция: строение и свойства

Барышникова О.В., Галлямов Э.М., Дейнеко Д.В., Мосунов А.В.,
Стефанович С.Ю., Лазорьяк Б.И.

МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
e-mail: sheeksana@yandex.ru

Сложные фосфатные системы со структурой пальмиерита, наряду с аналогичными молибдатами и вольфроматами могут представлять интерес как материалы для твердотельных лазеров и люминесцентных материалов. Изучение таких фосфатных систем ведется все более активно. Известно, например, что системы пальмиеритоподобной структурой $Me_3(PO_4)_2 \cdot R$ ($R = PЗЭ$, $Me = Sr, Ba$), являются эффективными люминофорами, с высокой интенсивностью свечения и большими временами жизни возбужденного состояния люминесцентного центра. Однако получение монокристаллов из таких фосфатов – затруднено. Этого недостатка лишены сложные пальмиеритоподобные ванадаты.

Широкая вариативность составов $Sr_{10.5-1.5x}R_x(\text{Э}O_4)_7$ ($R = PЗЭ$ и др., $\text{Э} = P, V$) определяется набором катионов, и может формировать разные структуры, в том числе пальмиерито – и витлокитоподобные (табл. 1).

Таблица 1.

$Sr_{10.5-1.5x}R_x(\text{Э}O_4)_7$			Структурный тип, при комн.температуре	Пр.гр.	Тип фазового перехода
R	Э				
Fe	V	+			-
	P	+ [1]	витлокит [1]	I2/a [1]	-
Cr	V	+			-
	P	+ [1]	витлокит [1]	I2/a [1]	-
In	V	-	витлокит [5]	R3c [5]	сегнетоэлектрический фазовый переход, $T_c = 773$ K [5]
	P	+ [1]	витлокит [1]	I2/a [1], C2/c [2]	антисегнетоэлектрический фазовый переход второго рода, $T_c = 773$ K [2, 3]
Bi	V	+ [4]	пальмерит [4]	-	-
	P	+	пальмерит	-	-
Sc	V	+	пальмерит	-	-
	P	+	витлокит [1]	I2/a [1]	-

Систематические и комплексные исследования подобных систем только начинают проводиться. В настоящей работе проведен высокотемпературный синтез, определены параметры кристаллических решеток, проведено тестирование методом генерации второй оптической гармоники и диэлектрической спектроскопии, определены температуры фазовых переходов.

Замещение части трехвалентного катиона в структуре $\text{Sr}_9\text{In}(\text{VO}_4)_7$ на широко известный люминесцирующий катион европия (Eu^{3+}) привело не только к проявлению люминесцирующих свойств (рис. 1, 2), но и повлияло на другие физико-химические свойства, в частности величину сигнала генерации второй оптической гармоники и температуру фазового перехода (рис.3, табл. 2).

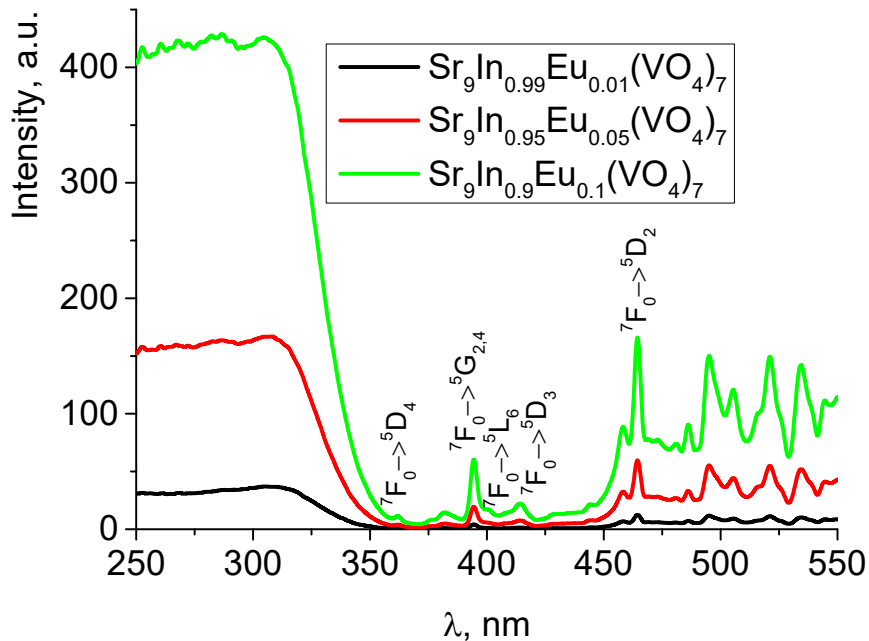


Рис. 1. Спектр возбуждения фотолюминесценции для образцов $\text{Sr}_9\text{In}_{0.99}\text{Eu}_{0.01}(\text{VO}_4)_7$, $\text{Sr}_9\text{In}_{0.95}\text{Eu}_{0.05}(\text{VO}_4)_7$, $\text{Sr}_9\text{In}_{0.9}\text{Eu}_{0.1}(\text{VO}_4)_7$, $\lambda_{\text{emission}} = 615 \text{ нм}$

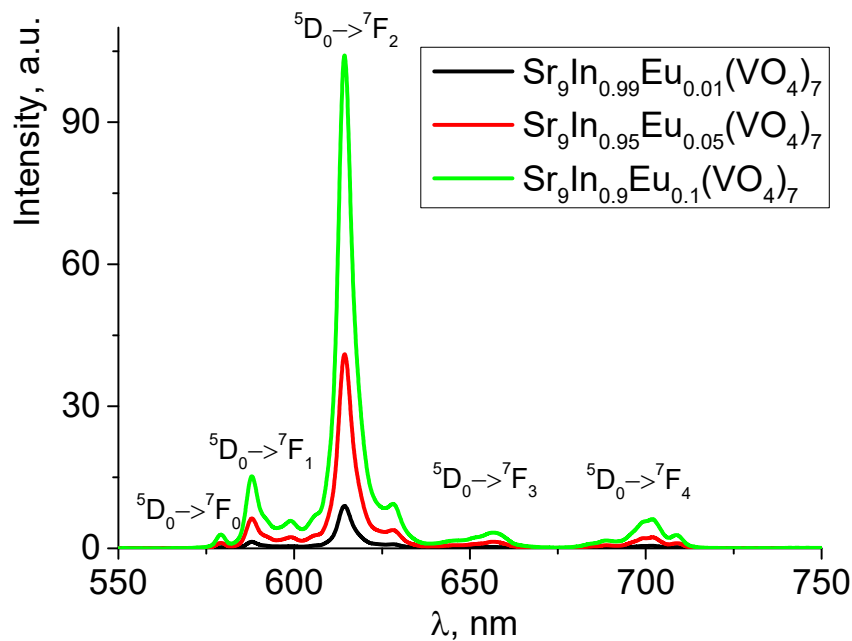


Рис. 2. Спектр фотолюминесценции для образцов $\text{Sr}_9\text{In}_{0.99}\text{Eu}_{0.01}(\text{VO}_4)_7$, $\text{Sr}_9\text{In}_{0.95}\text{Eu}_{0.05}(\text{VO}_4)_7$, $\text{Sr}_9\text{In}_{0.9}\text{Eu}_{0.1}(\text{VO}_4)_7$, $\lambda_{\text{excitation}} = 465 \text{ нм}$.

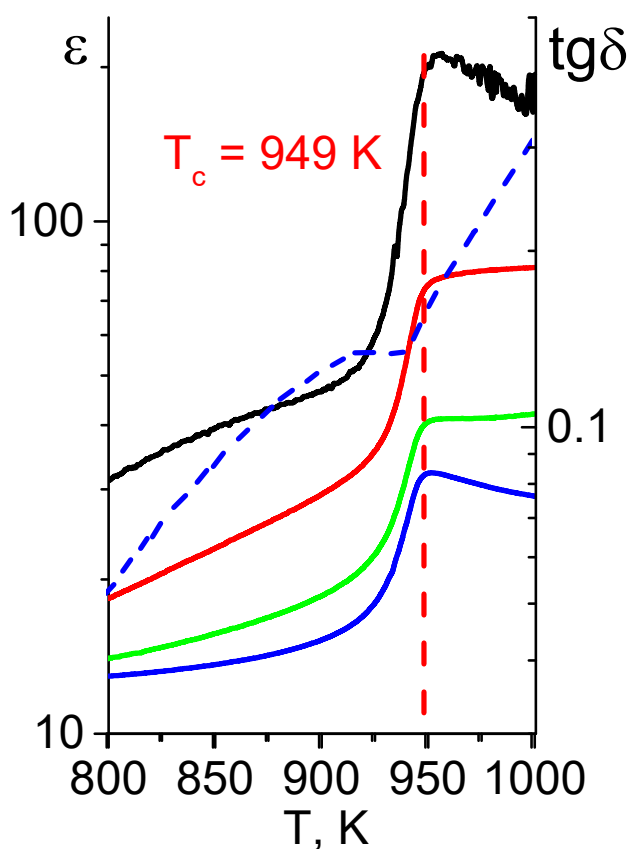


Таблица 2. Интенсивности величины сигнала ГВГ и температур фазовых переходов для системы $Sr_9In_{1-x}Eu_x(VO_4)_7$ ($0 \leq x \leq 0.5$)

x	ГВГ
0	12
0,01	11
0,05	10
0,1	10
0,2	8
0,5	2

Рис. 3. Температурные зависимости $Sr_9In_{0.9}Eu_{0.1}(VO_4)_7$: диэлектрической проницаемости (4) и тангенса угла диэлектрических потерь (5) на частотах 1 кГц(1), 10 кГц(2), 100 кГц(3) и 1000 кГц(4) в температурном интервале от 800 К до 1000 К.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 21-13-00102).

- [1] Belik A.A., Izumi F., Ikeda T., Okui M., Malakho A.P., Morozov V.A., Lazoryak B.I. J. Solid State Chemistry, **177**, 380 (2004).
- [2] Stefanovich S.Y., Belik A.A., Azuma M., Takano M., Baryshnikova O.V., Morozov V.A., Lazoryak B.I., Lebedev O.I., Van Tendeloo G. Physical Review B, **70**, 172103 (2004)
- [3] Deyneko D.V., Morozov V.A., Stefanovich S.Yu, Belik A.A., Lazoryak B.I., Lebedev O.I. Inorganic Materials, **52**, 176-185 (2016)
- [4] Malakho A.P., Kobyletskii K.K., Baryshnikova O.V., Morozov V.A., Stefanovich S.Y., Lazoryak B.I. Russian Journal of Inorganic Chemistry, **48**, 1700-1712 (2003)
- [5] Belik Alexei A., Deyneko Dina V., Baryshnikova Oksana V., Stefanovich Sergey Yu, Lazoryak Bogdan I. RSC advances(2020), **10**, 10867 (2020)

Размытый фазовый переход в селениде меди

Биккулова Н.Н.¹, Акманова Г.Р.², Курбангулов А.Р.¹, Мунасыпов И.М.¹,
Кутов А.Х.³, Цыганкова Л.В.¹

¹Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Уфа, Россия
e-mail: bickulova@mail.ru

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
e-mail: grakmanova@mail.ru

³Нефтяной институт (филиал) Югорского государственного университета,
г. Нижневартовск, Россия
e-mail: nnt.direktor@ugrasu.ru

Информативным методом при изучении фазовых переходов в сильно разупорядоченных системах является метод нейтронной дифракции. Поэтому структурные нейтронографические исследования проводились на дифрактометре E2 реактора НМИ (г. Берлин) на монохроматическом излучении с германиевым монохроматором Ge311 при длине волны $\lambda = 1,21 \text{ \AA}$. Во время эксперимента кристалл был ориентирован так, что плоскость (110) совпадала с плоскостью эксперимента определяемой векторами волновых векторов падающих и рассеянных нейтронов.

Были получены лауэграммы монокристалла $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ при температурах 300 К, 250 К, 200 К, 190 К, 180 К, 150 К и при обратном нагреве – 200 К, 230 К, 300 К. Время экспозиции составило 20 часов.

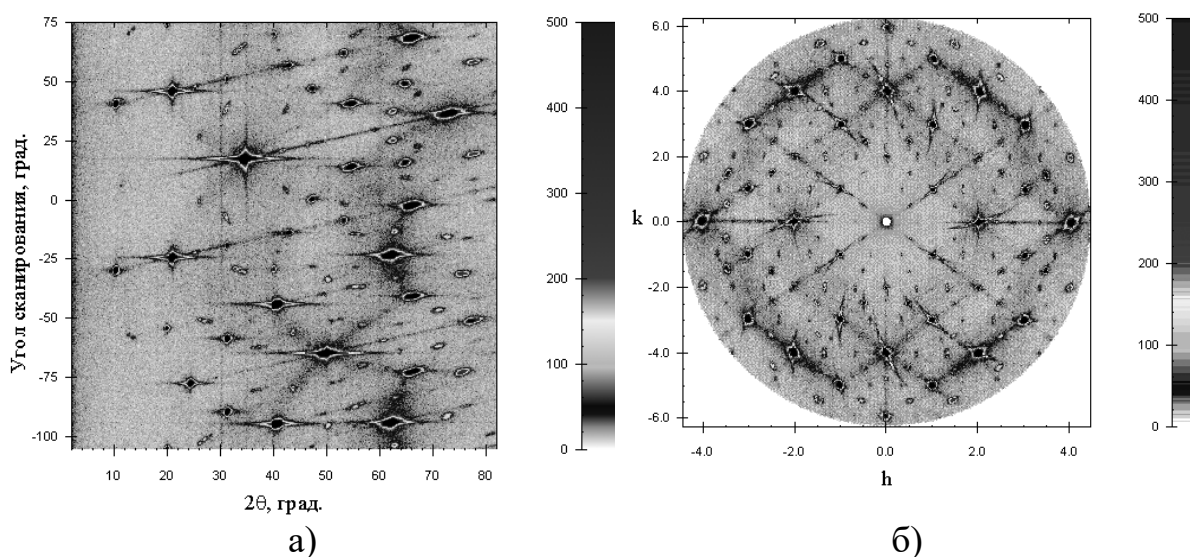


Рис. 1 Лауэграмма (а) и обратная решетка (б) состава $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ при 300 К

На лауэграмме (рис. 1) при комнатной температуре наблюдаются рефлексы ГЦК структуры, сверхструктурные рефлексы и широкие полосы диффузного рассеяния вдоль направлений [111]. Понижение температуры приводит к расщеплению основных дифракционных максимумов ГЦК фазы. В интервале температур 180–250 К наблюдаются рефлексы и

несуперионной, и суперионной фазы, что позволяет утверждать, что в этом температурном интервале существует смесь α - и β -фаз. Ниже температуры 180 К дифракционные максимумы, соответствующие кубической фазе, исчезают и появляются вновь при нагреве до 300 К. Переход из несуперионного состояния в суперионное является обратимым, но для восстановления «исходной фазы» требуется больше времени.

Наблюдаемые при 300 К диффузные полосы в ГЦК фазе исчезают при дальнейшем охлаждении и появляются вновь при обратном нагреве. Существование ярко выраженного диффузного гало в суперионной фазе связывается с разупорядочением подсистемы мобильных ионов меди.

Переход из суперионного состояния в несуперионное в селениде меди $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ сопровождается появлением дополнительных рефлексов на лауэграммах, что свидетельствует об образовании «зародышей» новой фазы. Сначала наблюдается образование «зародышей» α -фазы в области температур 180–250 К, с течением времени они полностью охватывают все «пространство» и при температуре 180 К переход в низкосимметричную фазу завершается.

Полученные экспериментальные данные согласуются с результатами работы [1] относительно существования смеси фаз. Уточнена температура фазового перехода в несуперионное состояние и она составляет 180 К, а не 200 К. На лауэграммах и усредненных интенсивностях в плоскости (110), полученных из лауэграмм, хорошо видно, что около 200 К еще наблюдаются рефлексы кубической ГЦК структуры, что свидетельствует о незавершенности этого перехода. Согласно [1] при 180 К наблюдаются аномалии на температурной зависимости электрофизических свойств, связанные с переходом в несуперионное состояние.

На основе экспериментальных данных об интенсивностях рефлексов было проведено исследование температурных изменений среднеквадратичных смещений атомов меди и селена. Для определения атомов Se были выбраны рефлексы (111) и (311), в интенсивность которых основной вклад дают только атомы Se. Для ионов Cu, аналогичным образом, были выбраны отражения от (220) и (400). Для атомов меди величина среднеквадратичных смещений при комнатной температуре составляет $2,75(3) \text{ \AA}$, что находится в хорошем согласии с данными рентгено- и нейтроноструктурного анализа. В селениде меди $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ ионы меди и селена обладают большими амплитудами тепловых колебаний. В области смеси фаз обнаружены флуктуации среднеквадратичных смещений атомов. Аналогичный факт наблюдается и в других суперионных проводниках [2, 3].

Соединение $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ при 300 К [4, 5] кристаллизуется в кубической ГЦК решетке с параметром $a = 5,763(5) \text{ \AA}$ и при 180 К переходит в моноклинную с параметрами $a = 7,091(1) \text{ \AA}$, $b = 12,352(4) \text{ \AA}$, $c = 7,129(3) \text{ \AA}$ и $\beta = 107,54(0)^\circ$ [6].

Таким образом, фазовый переход из суперионного в несуперионное состояние представляет собой размытый фазовый переход I рода, происходящий в интервале температур 250–180 К. В суперионной фазе обнаружено диффузное гало, связанное с разупорядочением катионной подсистемы.

- [1] T.Ohtani et al., *Alloys and Compounds* **279**, 136 (1998).
- [2] S.Geller, J.R.Akridge, S.A.Wilber, *Phys. Rev. B.* **19**, 5396 (1979).
- [3] Г.З.Идричан, Г.П.Сорокин, *Изв. АН СССР. Неорганические материалы* **11**, 1693 (1975).
- [4] R.D.Heyding, R.M.Murray, *Can. J. Chem.* **54**, 842 (1976).
- [5] Н.Н.Биккулова, Ю.М.Степанов, Л.В.Биккулова, А.Р.Курбангулов, А.Х.Кутов, Р.Ф.Карагулов, *Кристаллография* **58**, 603 (2013).
- [6] Н.Н.Биккулова, Г.Н.Асылгужина, С.Г.Титова, А.Д.Яналиев, *Известия РАН. Серия физическая* **69**, 939 (2005).

Исследования фазовых переходов в $\text{Cu}_{1.75}\text{Se}$ методом ЯМР

Акманова Г.Р.¹, Биккулова Н.Н.², Курбангулов А.Р.², Кутов А.Х.³,
Цыганкова Л.В.²

¹ Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

e-mail: grakmanova@mail.ru

² Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Уфа, Россия

e-mail: bickulova@mail.ru

³ Нефтяной институт (филиал) Югорского государственного университета,

г. Нижневартовск, Россия

e-mail: nnt.direktor@ugrasu.ru

Селенид меди относится к полупроводниковым соединениям, в которых обнаружена высокая ионная проводимость. Помимо высокой ионной проводимости (σ_i) $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ характеризуется высокими значениями коэффициентов химической диффузии (\tilde{D}) и самодиффузии (D_i).

Селенид меди Cu_2Se существует в двух модификациях. При температуре ~ 403 К наблюдается полиморфное превращение низкотемпературной α -фазы в суперионную β -фазу. Температура фазового перехода понижается с увеличением степени нестехиометричности (δ). Переход в суперионное состояние сопровождается разупорядочением катионной подрешетки.

Исследование распределения подвижных ионов в $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ в зависимости от температуры и степени нестехиометричности проведено Борхертом [1]. Им установлено, что α - $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$, а $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ даже при комнатной температуре, кристаллизуются в гранецентрированной кубической решетке с пространственной группой $F4-3m$. Соотношения интегральных интенсивностей рентгенограмм α - $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ с повышением и с понижением температуры изменяются непрерывно, и эти изменения не могут быть объяснены только влиянием температурного фактора.

Дальнейшее уточнение структуры $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ при комнатной температуре проведено в работах [2, 3]. В работе [2] для 12 независимых отражений при температуре 298 К для $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ ($a = 5,765$ Å) были посчитаны различные модели распределения ионов меди. Предпочтение было отдано модели, основанной на пространственной группе $Fm3m$ с атомами в следующих положениях: 5,12 Cu^+ расположены в тетраэдрических 8a позициях и 2 Cu^+ , распределены по тригональным 32e междоузлиям. Для атомов меди величина среднеквадратичных смещений при комнатной температуре составляет 2,75(3) Å, что находится в хорошем согласии с данными рентгено- и нейтроноструктурного анализа. В селениде меди $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ ионы меди и селена обладают большими амплитудами тепловых колебаний [3].

В области смеси фаз обнаружены флуктуации среднеквадратичных

смещений атомов. Аналогичный факт наблюдается и в других суперионных проводниках [4,5].

Ионный перенос в $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ в суперионном состоянии осуществляется движением ионов меди. Механизм этого процесса является сложным и его не удастся интерпретировать на основе экспериментальных результатов, полученных только макроскопическими методами изучения диффузии ионов в твердых телах – кондуктометрии, радиоактивных изотопов. Поэтому метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР), чувствительный к динамическим свойствам ионов в твердых телах, эффективен в исследовании таких соединений.

Особенностью структуры высокотемпературной кубической модификации селенида меди $\beta\text{-Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ является наличие жесткой структуры, образованной четырьмя ионами селена, в междоузлиях которой статистически распределены катионы как подвижные части решетки. Большое число энергетически равноценных междоузлий обуславливает высокую подвижность катионов и их слабую связь с жестким остовом.

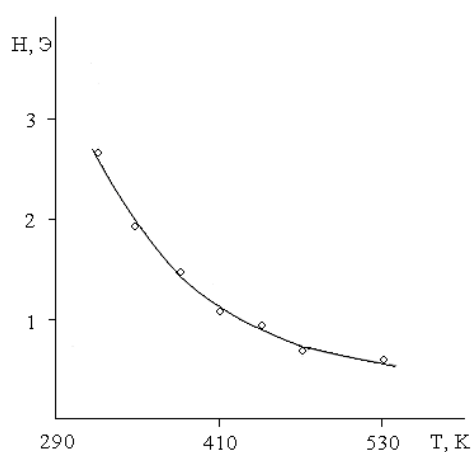


Рис. 1. Температурная зависимость ширины линий ЯМР ^{63}Cu в Cu_2Se

Температурная зависимость ширины спектральных линий для бинарного халькогенида меди Cu_2Se представлена на рис. 1. Сужение спектра ЯМР, вызванное интенсивным диффузионным движением резонирующих ядер, наблюдается при температуре выше комнатной в низкотемпературной α -фазе. Это означает, что кристаллическая решетка этого соединения не является жесткой уже при низких температурах, т.е. интенсивное диффузионное движение катионов меди с частотами $>10^4$ Гц появляется задолго до температуры фазового перехода в

высокотемпературную β -фазу, равной 403 К [7]. Отсутствие каких-либо аномалий в ходе зависимости $H(T)$ в точке фазового перехода указывает на то, что динамические свойства ионов меди не претерпевают скачкообразных изменений при переходе в суперионную фазу. Характер температурной зависимости ширины линий для других изученных составов – $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$, $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$, $\text{Cu}_{1,9}\text{Se}$, $\text{Cu}_{1,93}\text{Se}$, $\text{Cu}_{1,95}\text{Se}$ совпадает с представленными на рис. 1, температура сужения линии ЯМР для стехиометрического состава $\text{Cu}_{1,98}\text{Se}$ не совпадает с комнатной и составляет 320 К.

Кроме того, при переходе к образцам с большим значением отклонения от стехиометрического состава изменяется форма линии ЯМР ^{63}Cu . На рис. 2 представлен вид спектров ЯМР ^{63}Cu для образцов Cu_2Se , $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ и $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$. Сравнивая их, находим, что для линии ЯМР соединения $\text{Cu}_{1,98}\text{Se}$

характерна большая затынутость. Это свидетельствует о том, что наряду с диффундирующими в структуре присутствует значительное количество «неподвижных» (частота движения $< 10^4$ Гц) катионов меди, тогда как в $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ основная часть ионов меди участвует в диффузионном движении.

Оценены энергии активации ионов меди. Величина энергии активации ионов Cu^+ , полученная из ЯМР-измерений, совпадает в пределах погрешности с энергией активации ионов меди, полученной из измерений ионной проводимости на постоянном токе. Такое совпадение значений энергий активаций, полученных из ЯМР-измерений и измерений проводимости, объясняется в рамках теории ионного переноса в структурно-разупорядоченных системах [3].

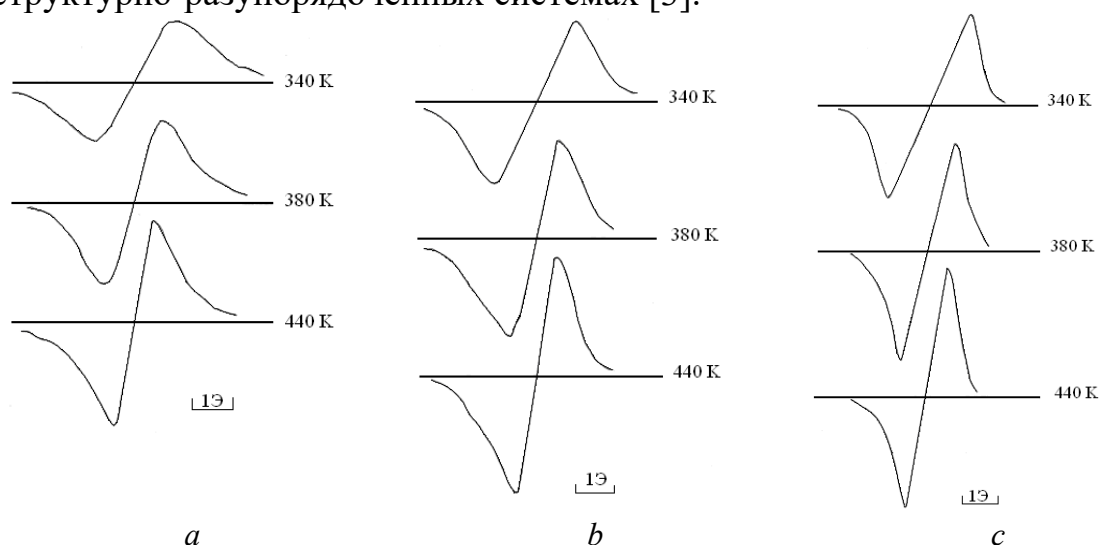


Рис. 2. Температурное поведение спектров ЯМР ^{63}Cu в Cu_2Se (a), $\text{Cu}_{1,8}\text{Se}$ (b), $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ (c)

Из структурных исследований следует, что ионы селена, образующие остов, имеют большие тепловые факторы Дебая-Уоллера и это обстоятельство свидетельствует о том, что и жесткий остов в суперионном состоянии находится в динамичном движении, что должно отразиться и в ЯМР спектрах ^{77}Se . В связи с этим был исследован ЯМР спектр ^{77}Se для $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ при различных температурах.

В нашей работе образец селенида меди $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ был исследован с помощью метода ЯМР в Лаборатории кинетических явлений Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН (г. Екатеринбург).

Спектр ЯМР ^{77}Se в $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ представляет собой одиночную линию с шириной на половине высоты ~ 4 кГц. По форме линия представляет собой смесь гауссовой и лоренцевой линий. Таким образом, все позиции Se в данной структуре должны быть кристаллографически эквивалентны, что

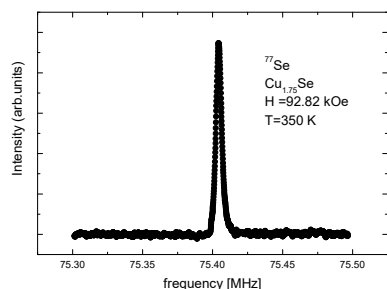


Рис.3. Спектр ЯМР ^{77}Se в $\text{Cu}_{1.75}\text{Se}$, записанный в поле 92.82 кЭ при $T = 350\text{ K}$

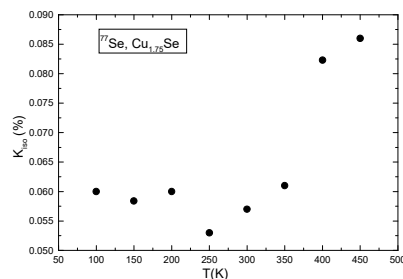


Рис.4. Температурная зависимость изотропного сдвига линии (K) ЯМР ^{77}Se в $\text{Cu}_{1.75}\text{Se}$, в магнитном поле 92.82 кЭ. ($K = (\nu - \nu_0)/\nu_0$; где ν – частота, соответствующая максимуму линии ЯМР, а $\nu_0 = 75.3528\text{ МГц}$)

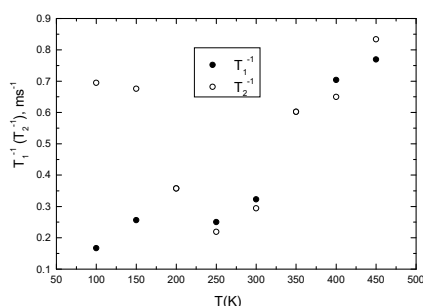


Рис.5. Температурные зависимости скоростей спин-спиновой и спин-решеточной релаксации (T_2^{-1} и T_1^{-1}) ^{77}Se в $\text{Cu}_{1.75}\text{Se}$

соответствует данным рентгеновской дифракции [3] и EXAFS [6], и не имеется примесных фаз, содержащих селен.

При повышении температуры выше 250 К сдвиг этой линии возрастает (рис. 6), что согласуется с поведением магнитной восприимчивости. В области температур 100–200 К сдвиг практически не меняется. В области температур 200–450 К скорости поперечной и продольной релаксации равны (с точностью до погрешности) (рис. 7). Это явление крайне редко наблюдается в твердых телах, в основном, это

характерно для жидкости, где гомоядерное диполь-дипольное взаимодействие эффективно усредняется за счет броуновского движения молекул. В данном случае, основным механизмом, усредняющим диполь-дипольное взаимодействие является, вероятно, движение ионов меди. Ниже 200 К (~ 230) вследствие фазового перехода, ионы меди частично локализованы и поведение скоростей спин-спиновой и спин-решеточной релаксации (а также их значения) отличаются.

[1] W.Borchert, Physik **114**, 515 (1939).

[2] R.D.Heyding, R.M.Murray, Can. J. Chem. **54**, 842 (1976).

[3] Н.Н.Биккулова, Ю.М.Степанов, Л.В.Биккулова, А.Р.Курбангулов, А.Х.Кутов, Р.Ф.Карагулов, Кристаллография **58**, 603 (2013).

[4] S.Geller, J.R.Akridge, S.A.Wilber, Phys. Rev. B. **19**, 5396 (1979).

[5] С.А.Алиев, Ф.Ф.Алиев, З.С.Гасанов, ФТТ **40**, 1693 (1998).

[6] Н.Н.Биккулова, Г.Н.Асылгужина, С.Г.Титова, А.Д.Яналиев, Известия РАН. Серия физическая **69**, 939 (2005).

[7] Р.Ф.Кадргулов, А.И.Лившиц, Р.А.Якшибаев, ФТТ **34**, 2143 (1992).

[8] A.Sirusi, S.Ballikaya, C.Uher, J.H.Ross, Phys. Chem. **119**, 20293 (2015).

Секция В2

Топологические материалы,
магнитотранспорт и
спинтроника

Nutation excitations in the gyrotropic vortex dynamics in a circular magnetic nanodot

Gareeva Z.V.¹, Guslienko K.Y.^{2,3}

¹ Institute of Molecule and Crystal Physics, Subdivision of the Ufa Federal Research Centre of the Russian

Academy of Sciences, 450075 Ufa, Russia
e-mail: zukhragzv@yandex.ru

² Depto. Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, Universidad del País Vasco, UPV/EHU, 20018 San Sebastián, Spain

³IKERBASQUE, the Basque Foundation for Science, 48009 Bilbao, Spain
e-mail: kostyantyn.guslienko@ehu.es

Quite recently, the topic of nutations in the magnetization dynamics attracted an essential attention due to the resonance effects that manifest themselves in the high-frequency range at the picosecond timescale [1].

We explore the gyrotropic vortex dynamics in a circular soft magnetic nanodot, focusing on the impact given by nutation in the high – frequency part of the dot spin excitation spectrum. Using a modified Thiele equation of the vortex core motion with a nutation term, we analyze the dynamic response of the vortex to an oscillating magnetic field applied in the dot plane. We consider the permalloy thin circular nanodots with the typical magnetic and geometrical parameters. Our findings showed that i) the resonant frequencies of gyrotropic and nutational vortex core motions reveal themselves on different scales: gigahertz for the gyrotropic motion, and terahertz for the nutations; ii) accounting for the nutations affects the trajectory of the vortex core: the directions of the vortex core motion in the gyrotropic mode and the nutation mode are opposite; iii) the resulting spin dynamics is a superposition of precession and nutation. The differences in the senses of rotation of two spin modes are reflected in the frequency dependences of imaginary part of the dynamic susceptibility $\chi''(\omega)$ [2], shown in Figure 1. Our estimations of the nutation resonance linewidth $1/\tau$ for characteristic nutation time τ of the order $10^{-12} - 10^{-11}$ s give the values order of 0.5 - 1 THz, comparable to ones

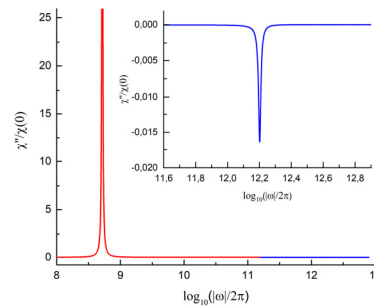


Fig. 1. Reduced dynamic susceptibility $\chi''(\omega)/\chi(0)$ of the vortex state permalloy circular nanodot vs. frequency plotted using the nutation time τ taken from the experimental data [1]. The dot radius is 100 nm and thickness is 10 nm. Пример вставки рисунка.

experimentally detected for the nutation resonance in the CoFeB and FeNi thin films in Ref. [1].

We argue that the nutation induces a dynamic vortex mass and give estimates of the nutational mass by comparing with the mass appearing due to the interactions of a moving vortex with spin waves [3] and the Doering domain wall mass. Nutation – induced mass depends on the nutation time, the sizes of nanodot and the parameters of magnetic material, for thin permalloy nanodot (with the radius of 100 nm, and thickness of 10 nm) it attains the magnitude about of $10^{-23} - 10^{-22}$ g.

The support of the Russian Science Foundation, grant number 23-22-00225 is kindly acknowledged.

[1] K. Neeraj, et al. Inertial Spin Dynamics in Ferromagnets. *Nat. Phys.* **17**, 245–250 (2021).

Передача спинового момента и нелинейный квантовый электронный транспорт в хиральных гелимагнетиках

Устинов В.В., Ясюлевич И.А.

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

e-mail: ustinov@imp.uran.ru

В работе построена теория электросопротивления гелимагнетика, обусловленного действием на электроны проводимости неоднородного обменного поля, которое создается упорядоченными в спираль спиновыми моментами локализованных электронов, с учетом передачи спинового момента из системы электронов проводимости в спиновую систему магнитной спирали [1].

При наличии неоднородного поля учёт квантового характера спина движущихся электронов приводит к возникновению квантовой добавки к классической силе Лоренца. В гелимагнетиках наличие квантовой добавки вызывает изменение потока электронов, следствием чего является рост электросопротивления [2] и возникновение электрического магнитохирального эффекта Штерна-Герлаха – эффекта зависимости электросопротивления гелимагнетика от его хиральности и взаимной ориентации внешнего магнитного поля и электрического тока, протекающего вдоль оси спирали [3]. На электрические свойства проводящих гелимагнетиков существенное влияние будет оказывать еще один квантовый эффект – эффект передачи спинового момента (ПСМ). Эффект ПСМ в гелимагнетиках приводит к изменению формы и возникновению вращения спиновой спирали под действием протекающего вдоль оси спирали электрического тока [4]. Влияние ПСМ на изменение конфигурации спирали намагниченности гелимагнетика \mathbf{M} при протекании через него электрического тока естественным образом приведет к изменению воздействия неоднородного обменного поля $\Lambda\mathbf{M}$ на движение электронов. В этой связи возникает необходимость в детальном изучении спинового электронного транспорта в гелимагнетиках под влиянием неоднородных обменных полей в условиях действия эффекта ПСМ.

Для этой цели мы, используя аппарат квантового кинетического уравнения, получили систему уравнений движения для плотности электрического тока \mathbf{j} , тензора плотности потока намагниченности \mathbf{J} и намагниченности электронов проводимости \mathbf{m} :

$$\mathbf{j} = \sigma_F \mathbf{E} + \frac{e\tau\Lambda}{m_e} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \otimes \mathbf{M} \right) \cdot \delta \mathbf{m}, \quad (1)$$

$$\mathbf{J} = \frac{e\tau}{m_e} \mathbf{E} \otimes \mathbf{m} - D \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \otimes \delta \mathbf{m}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{m} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{J} + \gamma [\mathbf{m} \times \Lambda \mathbf{M}] + \frac{1}{\tau_s} \delta \mathbf{m} = 0. \quad (3)$$

Здесь τ – время релаксации импульса, τ_s – время релаксации спина электронов проводимости, m_e – эффективная масса электрона, e – заряд электрона, D – коэффициент электронной диффузии, γ – гиромагнитное отношение, σ_F – проводимость гелимагнетика в «ферромагнитном» состоянии с однородной намагниченностью, знак \otimes обозначает тензорное произведение векторов. Величина $\delta \mathbf{m} = \mathbf{m} - \mathbf{m}_0$ суть отклонение намагниченности электронов проводимости \mathbf{m} от своего локально-равновесного значения $\mathbf{m}_0(\mathbf{r}, t) = \chi [\mathbf{B} + \Lambda \mathbf{M}(\mathbf{r}, t)]$, χ – восприимчивость Паули электронного газа.

Система уравнений (1)-(3) была дополнена уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта, описывающим динамику намагниченности локализованных электронов \mathbf{M} :

$$\partial \mathbf{M} / \partial t + \gamma [\mathbf{M} \times \mathbf{B}_M^{(\text{eff})}] + (\alpha / M) [\partial \mathbf{M} / \partial t \times \mathbf{M}] = 0, \quad (4)$$

где α – постоянная Гильберта, определяющая скорость затухания колебаний намагниченности \mathbf{M} . Выражение для действующего на \mathbf{M} эффективного магнитного поля $\mathbf{B}_M^{(\text{eff})}$ было получено нами для хиральных гелимагнетиков, в которых намагниченность локализованных электронов выстраивается в спираль за счёт наличия взаимодействия Гейзенберга, взаимодействия Дзялошинского-Мория и магнито-кристаллической анизотропии.

Совместное решение уравнений для намагниченности локализованных электронов \mathbf{M} и намагниченности электронов проводимости \mathbf{m} позволило нам найти связь этих намагниченностей, учитывающую эффект ПСМ. Подстановка найденной связи в уравнение для плотности электрического тока \mathbf{j} позволила нам описать электрическое сопротивление металлических гелимагнетиков, в которых из-за эффекта ПСМ изменяется форма и возникает вращение спирали намагниченности.

В работе показано, что сопротивление гелимагнетика ρ может быть представлено в виде

$$\rho = \rho_F + \rho_S, \quad (6)$$

где ρ_F – удельное электросопротивление гелимагнетика в «ферромагнитном» состоянии с однородной намагниченностью, ρ_S – квантовый спиновый вклад в электросопротивление, обусловленный неоднородным обменным полем магнитной спирали и эффектом ПСМ.

Если константа затухания Гильберта α достаточно велика, то вращение спиновой спирали гелимагнетика под действием протекающего электрического тока предельно затруднено и в первом приближении магнитную спираль можно считать неподвижной. В этом случае величина

спинового вклада в электросопротивление определяется только эффективной скоростью релаксации спина электронов проводимости v_0 :

$$\rho_S \cong \chi \Lambda^2 M^2 q^2 / e^2 n^2 v_0. \quad (7)$$

Здесь q – волновое число магнитной спирали, n – плотность электронов.

В случае, когда параметр затухания Гильберта α достаточно мал, слабое затухание колебаний магнитной спирали гелимагнетика приводит к тому, что она легко «подстраивается» под движение намагниченности электронов проводимости и поэтому дает тем меньший вклад в электросопротивление, чем меньшее значение имеет параметр затухания Гильберта. В этом случае величина спинового вклада в электросопротивление определяется только величиной параметра затухания Гильберта α :

$$\rho_S \cong \alpha M q^2 / \gamma e^2 n^2. \quad (8)$$

При определенных соотношениях параметров, характеризующих гелимагнетик, возможна ситуация, когда при протекании тока в системе возникает «спиновая электрическая бистабильность» – явление существования в гелимагнетике двух состояний спиновой спирали с различным электросопротивлением при одном и том же значении протекающего в гелимагнетике электрического тока. В этом случае вольт-амперная характеристика гелимагнетика будет существенно нелинейной. В условиях существования спиновой электрической бистабильности дифференциальное электросопротивление гелимагнетика может принимать сколь угодно большие отрицательные значения. Эта особенность электрорезистивных свойств гелимагнетиков может представлять интерес для их возможного использования как новых материалов для приборов и устройств магнито-электроники.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 22-22-00220.

- [1] В. В. Устинов, И. А. Ясюлевич, Передача спинового момента и нелинейный квантовый электронный транспорт в хиральных гелимагнетиках, ЖЭТФ (в печати).
- [2] В. В. Устинов, И. А. Ясюлевич, Электронный спиновый ток и спин-зависимые гальваномагнитные явления в металлах, ФММ **121**, 257 (2020).
- [3] V. V. Ustinov, I. A. Yasyulevich, Electrical magnetochiral effect and kinetic magnetoelectric effect induced by chiral exchange field in helical magnetics, Phys. Rev. B **102**, 134431 (2020).
- [4] V. V. Ustinov, I. A. Yasyulevich, Chirality-dependent spin-transfer torque and current-induced spin rotation in helimagnets, Phys. Rev. B **106**, 064417 (2022).

Evolution of transport properties in the family of magnetic topological insulators $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ ($m = 0, \dots, 6$)

Zverev V.N.¹, Abdullayev N.A.^{2,3}, Aliguliyeva K.V.^{2,3}, Aliev Z.S.^{2,3},
Amiraslanov I.R.^{2,3}, Mamedov N.T.², Chulkov E.V.^{4,5}

¹ Institute of Solid State Physics RAS, Chernogolovka, Moscow district, Russia
e-mail: zverev@issp.ac.ru

² Institute of Physics, National Academy of Sciences of Azerbaijan, Baku, Azerbaijan

³ Baku State University, Baku, Azerbaijan

⁴ Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia

⁵ Donostia International Physics Center, Donostia-San Sebastián, Basque Country, Spain

After our discovery [1] of a new antiferromagnetic (AFM) topological insulator (TI) MnBi_2Te_4 , a large family of intrinsic magnetic TIs in the homologous compounds $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ with $m = 0, 1, \dots, 6$ were studied [2]. The homologous series of van der Waals compounds $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ are layered crystals created from the set of septuple layer blocks of MnBi_2Te_4 (SL), which are 2D magnets, and non-magnetic quintuple layer blocks of Bi_2Te_3 (QL).

The data on ARPES confirm the linear dispersion $E(k)$ for the surface states as well as the existence of the energy gap between the Dirac cones [1,2]. Here we present the data on the magneto-transport properties of this family for $m=0, \dots, 6$, namely, the temperature dependences of the resistivity $R(T)$, magnetoresistance $R_{xx}(B)$ and Hall effect $R_{xy}(B)$ at low temperatures. Magnetic and electronic transport properties of these materials depend strongly on the m value and are thus highly tunable. The crystals with $m=0, 1$ are antiferromagnets. Their Neel temperature goes down from 25 K for $m=0$ to 13.2 K for $m=1$, then the critical temperature decreases monotonously saturating to about 11 K for $m \geq 4$ as it is shown in Fig.1.

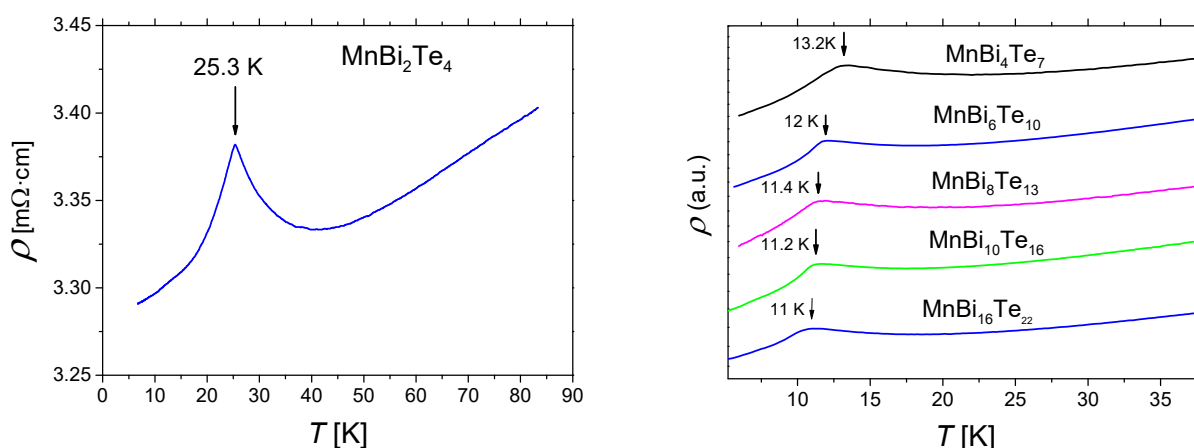


Fig.1. Temperature dependences of samples resistivity with $m=0, 1, \dots, 6$.

The increase in m leads to change of the overall magnetic behavior from AFM for $m=0, 1$ to ferromagnetic (FM) one for $m \geq 2$. Interestingly, for $m=2$ we observe some competition between AFM and FM states. For $m=6$, i.e. when 2D magnets

are separated by six non-magnetic QL blocks, the samples still demonstrate FM behavior. At greater separation between SL blocks their FM ordering should be lost and the sample will be paramagnetic with chaotic orientation of 2D FM layers. The question at what m -value this state will take place is still opened and requires further experiments.

The variety of intrinsic magnetic TI phases in $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ allows efficient engineering of functional van der Waals heterostructures for topological quantum computation, as well as antiferromagnetic and 2D spintronics.

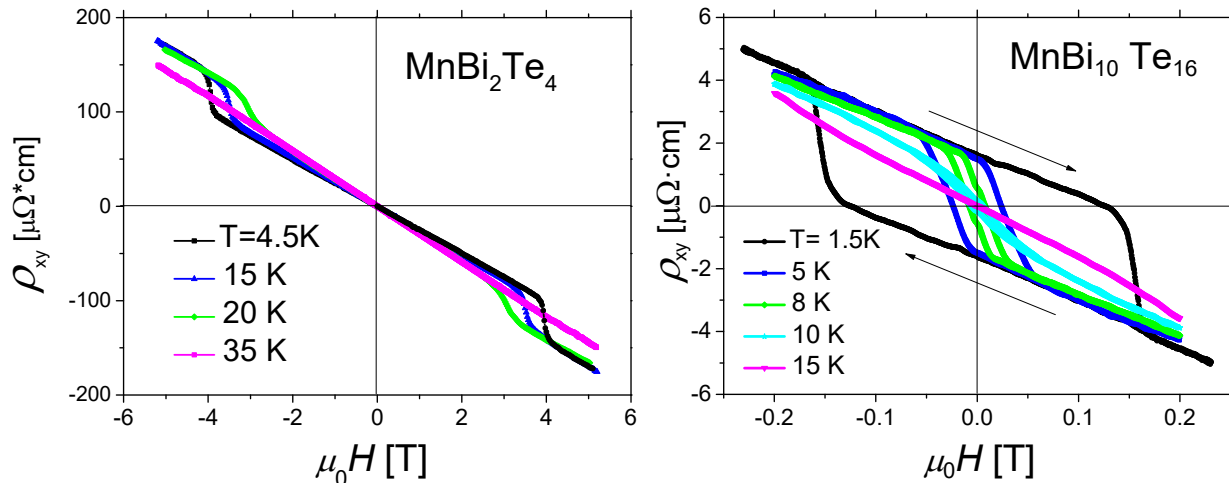


Fig.2. a) Field-induced AFM-FM transition detected by Hall effect in MnBi_2Te_4 , b) Anomalous Hall effect in FM sample $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$ at different temperatures.

- [1] M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann, et al, *Nature*, 576, 19/26, 416-437 (2019)
- [2] I. I. Klimovskikh, M.M. Otrokov, D. Estyunin, et al, *Quantum Materials*, 5, 54 (2020)

Особенности проявления медленной динамики в магнитосопротивлении мультислойных и спин-вентильных наноструктур

Евстафьева Ю.К.¹, Мамонова М.В.¹, Прудников В.В.¹, Прудников П.В.²

¹ Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

² ЦНХТ ИК СО РАН, Омск, Россия

e-mail: yuliaevstafyeva@gmail.com

Неравновесное поведение магнитных мультислойных наноструктур характеризуется медленной релаксационной динамикой намагниченности за счет реализующейся в них сильной пространственной спиновой корреляции. Проведенные экспериментальные [1] и численные [2, 3] исследования релаксации намагниченности и временного поведения корреляционных функций выявили в магнитных структурах Co/Cr и Co/Cu эффекты старения, которые характеризуются замедлением релаксационных и корреляционных свойств системы с ростом времени ожидания и проявляются не только вблизи критической температуры T_c магнитного упорядочения, как в объемных системах, но и в широком температурном интервале с $T \leq T_c$. Было показано [3,4], что медленная спиновая динамика в данных структурах приводит к сложному двухвременному поведению магнитосопротивления.

Мы представляем Монте-Карло исследование неравновесного поведения трехпленочных наноструктур Co/Cu(001)/Co с намагниченностью в плоскости пленок, а также спин-вентильных структур Co/Cu(001)/Co/АФ, в которых намагниченность одной из ферромагнитных пленок Co закреплена соседним слоем антиферромагнетика АФ. Рассматривается влияние особенностей неравновесного поведения данных структур на их магнитосопротивление при воздействии различных начальных состояний. Были рассмотрены магнитные структуры с толщинами ферромагнитных пленок $N=3, 5, 7, 9$ в единицах моноатомных слоев (МС). Моделирование осуществлялось для структур с ферромагнитными пленками размером $L \times L \times N$ и наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки. Значения обменных интегралов внутрислоевого взаимодействия задавались как $J_1/k_B T=1$, а межслоевого взаимодействия $J_2/J_1= - 0.1$ для Co/Cu(001)/Co и $J_2/J_1= 0.01$ для спинового вентидя. Температура T системы измеряется в единицах обменного интеграла J_1/k_B . Соответствующим подбором толщины немагнитной медной прослойки достигается изменение величины и знака обменного межслоевого взаимодействия J_2 с отрицательного антиферромагнитного в трехпленочных структурах на ферромагнитное взаимодействие пленок в спиновых вентильных с относительно большой

толщиной 1.5 – 5 нм прослойкой меди. Ослабление величины межслоевой обменной связи обеспечивает низкие поля насыщения в спиновых вентилях.

Магнитные свойства наноструктур описываются анизотропной моделью Гейзенберга [5], задаваемой для структуры с намагниченностью ориентированной в плоскости пленки, гамильтонианом

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \{ S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + (1 - \Delta(N)) S_i^z S_j^z \}. \quad (1)$$

В выражении (1) $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор спина, зафиксированный в i -ом узле ГЦК-решетки пленок кобальта, $\Delta(N)$ – параметр, учитывающий эффективное влияние магнитной анизотропии, создаваемой межфазным взаимодействием пленок с толщинами N [5].

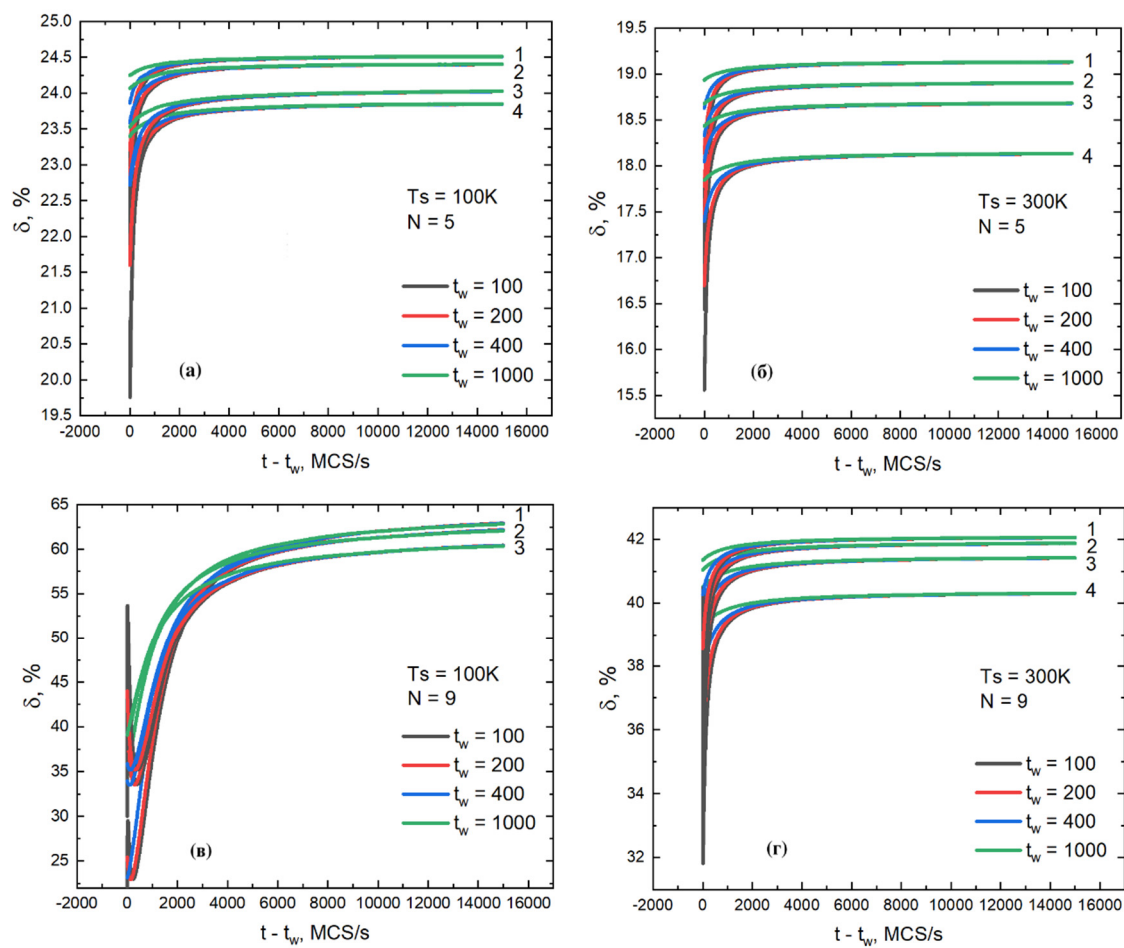


Рис. 1. Временная зависимость ТМР-магнитосопротивления в Co/Cu/Co с толщинами пленок кобальта (а) и (б) $N=5$, (в) и (г) $N=9$ МС при температурах замораживания $T_s=100$ К (а, в) и $T_s=300$ К (б, г) для времен ожидания $t_w=100, 200, 400, 1000$ MCS/s при эволюции из начальных состояний с температурами: (а) 1 - $T_0=0$ К, 2 - $T_0=50$ К, 3 - $T_0=200$ К, 4 - $T_0=300$ К; (б) 1 - $T_0=0$ К, 2 - $T_0=100$ К, 3 - $T_0=200$ К, 4 - $T_0=400$ К; (в) $T_0=0$ К, 2 - $T_0=100$ К, 3 - $T_0=300$ К; (г) 1 - $T_0=0$ К, 2 - $T_0=100$ К, 3 - $T_0=200$ К, 4 - $T_0=400$ К.

Моделирование транспортных свойств магнитных структур с током перпендикулярным плоскости пленок (ТПП) с использованием разработанной в [6] методики позволяет рассчитать как температурную зависимость равновесного магнитосопротивления $\delta^{(eq)}(T, N)$ [7], так и неравновесную двухвременную зависимость магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ [3,4]. В данной работе мы исследовали влияние различных начальных состояний на двухвременную зависимость ТПП магнитосопротивления.

На рис. 1 представлены результаты расчета временных зависимостей магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ для структур Co/Cu/Co для температур замораживания $T_s = 100$ К и 300 К при различных начальных температурах T_0 . Введена абсолютная шкала температур, задаваемая через величину интеграла обменного взаимодействия $J_1 = 4.4 \cdot 10^{-14}$ эрг для кобальта, рассчитанного в приближении среднего поля. Выявлено существенное влияние начальных состояний с различными T_0 на временные зависимости магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ с проявлением в них эффектов старения, а именно зависимости магнитосопротивления от времени ожидания t_w - начала измерения магнитосопротивления. Показано, что временная зависимость $\delta(t, t_w)$ в долговременном режиме выходит на плато с асимптотическими значениями $\delta^\infty(N, T_0, T_s)$, зависящими от температур T_0 начального состояния, температур замораживания T_s и толщины ферромагнитных пленок N . Наибольшими асимптотическими значениями $\delta^\infty(N, T_0, T_s)$ для структур с фиксированными N и T_s характеризуются случаи, полученные при эволюции из начального состояния с $T_0 = 0$, а наименьшими $\delta^\infty(N, T_0, T_s)$ - из высокотемпературных начальных состояний с $T_0 > T_s$. Демонстрируется рост значений $\delta^\infty(N, T_0, T_s)$ с увеличением толщин ферромагнитных пленок N и понижением температур замораживания T_s . Времена выхода магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ на плато уменьшаются с ростом времени ожидания t_w и увеличиваются с ростом толщины ферромагнитных пленок N в структуре, принимая значения $1000 \div 4000$ MCS/s, что соответствует $10^5 \div 10^6$ с или 3 - 10 часам.

На рис. 2 представлены результаты аналогичных исследований временных зависимостей магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ для спин-вентильных структур Co/Cu/Co/АФ. Выявлено проявление эффектов старения, т.е. зависимость магнитосопротивления от времени ожидания t_w . Наблюдается рост значений магнитосопротивления на плато $\delta^\infty(N, T_s)$ с увеличением толщин ферромагнитных пленок N и понижением температур замораживания T_s . Выявлено отсутствие влияния начальных температур T_0 на асимптотические значения магнитосопротивления $\delta^\infty(N, T_s)$, обусловленное воздействием поля обменного смещения со стороны пленки антиферромагнетика. Показано, что характерные времена выхода магнитосопротивления на плато составляют несколько тысяч шагов Монте-Карло на спин и растут с увеличением времени ожидания t_w .

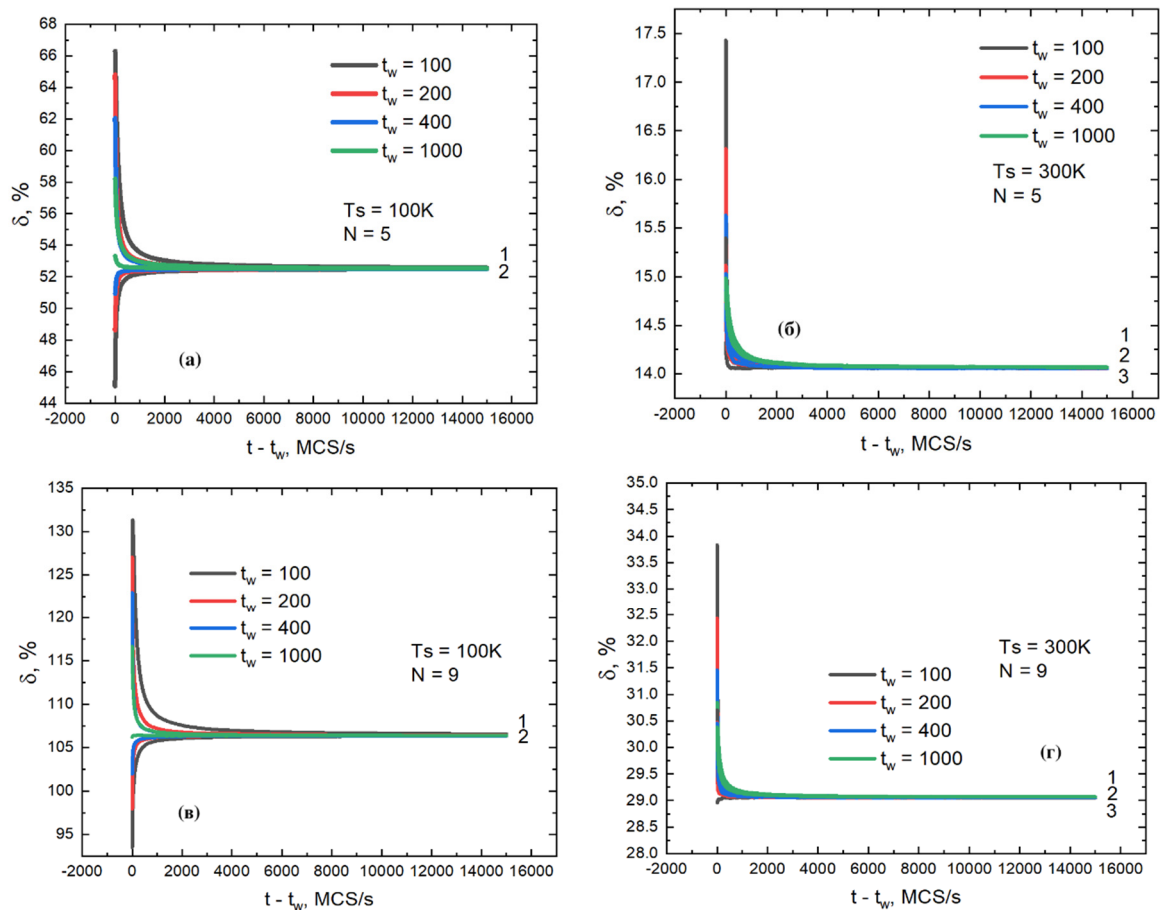


Рис. 2. Временная зависимость ТМР-магнитосопротивления в спиновом вентиле $Co/Cu/Co/A\Phi$ с толщинами пленок кобальта (а) и (б) $N=5$, (в) и (г) $N=9$ МС при температурах замораживания $T_s=100$ К (а, в) и $T_s=300$ К (б, г) для времен ожидания $t_w=100, 200, 400, 1000$ MCS/s при эволюции из начальных состояний с температурами: (а) 1 - $T_0=0$ К, 2 - $T_0=200$ К; (б) 1 - $T_0=0$ К, 2 - $T_0=200$ К, 3 - $T_0=400$ К; (в) $T_0=0$ К, 2 - $T_0=200$ К; (г) 1 - $T_0=0$ К, 2 - $T_0=200$ К, 3 - $T_0=400$ К.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 23-22-00093.

- [1] T.Mukherjee, M.Pleimling, C.Binek, Phys. Rev. B **82**, 134425 (2010).
- [2] В.В.Прудников, П.В.Прудников, А.Н.Пуртов, М.В.Мамонова, Письма в ЖЭТФ, **104**, 797 (2016).
- [3] V.V.Prudnikov, P.V.Prudnikov, M.V.Mamonova, M.M.Firstova, A.A.Samoshilova, J. Phys. Commun., **3**, 015002 (2019).
- [4] В.В.Прудников, П.В.Прудников, М.В.Мамонова, ЖЭТФ **154**, 855 (2018)
- [5] P.V.Prudnikov, V.V.Prudnikov, M.A.Menshikova, N.I.Piskunova, ЖМММ **387**, 77 (2015).
- [6] В.В. Прудников, П.В. Прудников, Д.Е.Романовский, Письма в ЖЭТФ **102**, 759 (2015).
- [7] P.V.Prudnikov, V.V.Prudnikov, M.V.Mamonova, N.I.Piskunova, ЖМММ **482**, 201 (2019).

Электро- и магнитосопротивление Cd_3As_2 + 44.7 мол. % MnAs при высоких давлениях

Сайпулаева Л.А.¹, Мельникова Н.В.², Гаджиев А.М.^{1,5}, Гаджиалиев М.М.¹,
Тебеньков А.В.², Бабушкин А.Н.², Захвалинский В.С.³, Риль А.И.⁴,
Маренкин С.Ф.⁴

¹ Институт физики ДФИЦ РАН, 367015, Россия, Республика Дагестан, г. Махачкала,
ул. М. Ярагского, 94

² Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики,
Екатеринбург 620002

³ Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород 308015

⁴ Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва 119991

⁵ Дагестанский государственный университет

e-mail: ali.gadzhiev21@gmail.com

Введение

Объёмный Cd_3As_2 интенсивно изучался задолго до открытия в нем дираковских фермионов и топологических свойств. В частности, было известно, что при температурах до 503 К арсенид кадмия имеет относительно сложную кристаллическую структуру с 160 атомами в элементарной ячейке. Cd_3As_2 кристаллизуется в тетрагональной сингонии с параметрами элементарной ячейки $a = b \approx 1,26$ нм и $c \approx 2,54$ нм [1].

Теоретические и экспериментальные работы показали, Cd_3As_2 является дираковским полуметаллом, который обладает чрезвычайно высокой подвижностью [2, 3] и линейным положительным магнетосопротивлением без насыщения [4], что представляет колоссальный интерес для ряда практических применений.

Цель настоящей работы: экспериментальное исследование высокого влияния давления на электро- и магнитосопротивления Cd_3As_2 с содержанием наногранул MnAs .

Методика измерений

Синтез объёмных кристаллов проводился вакуумно-ампульным методом из соединений Cd_3As_2 и MnAs при температуре плавления арсенида марганца [5]. Полученные образцы характеризовались методами рентгеновской дифракции (XRD).

Рентгенограмма нанокompозита Cd_3As_2 + 44.7 мол. % MnAs (рис. 1) подтверждает, что он состоит из двух фаз: Cd_3As_2 и MnAs (некоторые рентгенограммы дают минорные пики, относящиеся к CdAs_2).

Влияние высокого давления на электрофизические свойства $\text{Cd}_3\text{As}_2 + \text{MnAs}$ исследовали в камере высокого давления (КВД) с алмазными наковальнями типа «закругленный конус-плоскость». Принцип создания

давлений до 50 ГПа, технические характеристики и градуировка КВД описаны в деталях в [6-8].

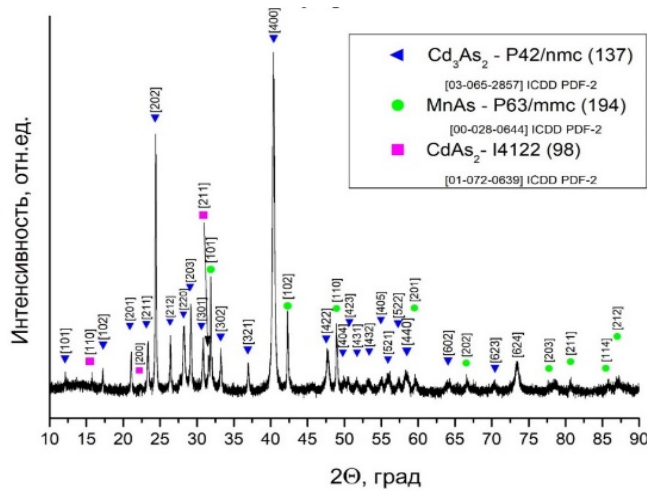
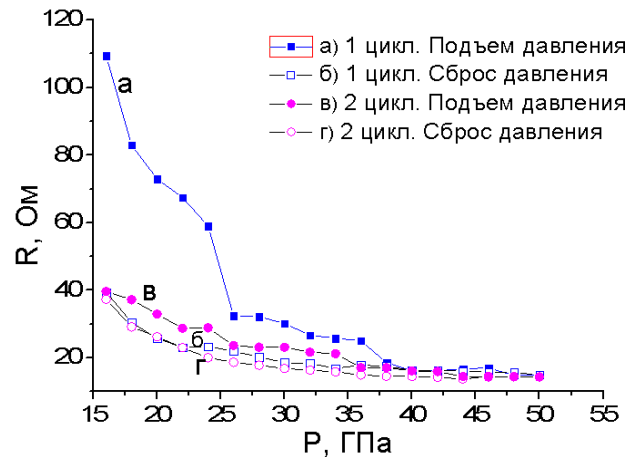


Рис. 1 Рентгенограмма образца Cd_3As_2 + 44.7 mol. % $MnAs$

Результаты эксперимента

На рис.2 представлены барические зависимости электросопротивления Cd_3As_2 +44,7 мол. % $MnAs$ при двух циклах подъема и сброса давления в области комнатных температур. В первом цикле при росте давления R наблюдается уменьшение электросопротивления R в барическом интервале 20-40 ГПа и медленное или практически малое изменение величины R при $R \geq 40$ ГПа.

Рисунок 2 – Зависимости электрического сопротивления от давления



При сбросе давления зависимость $R(P)$ в обоих циклах измерений демонстрировала гистерезисное поведение. Факт существования гистерезиса электросопротивления в Cd_3As_2 + 44,7 мол. % $MnAs$ в интервале давлений 15-50 ГПа представляется весьма интересным, поскольку он может свидетельствовать в пользу структурного перехода, происходящего в Cd_3As_2 , структура которого при давлениях выше 4.67 ГПа является уже моноклинной ($P2_1/c$) [9]. Однако, исходя из данных рентгеновской дифракции, приведенных в работе [9], моноклинная фаза регистрировалась до давлений 17.8 ГПа, в то время как ее преобладание до давлений 50 ГПа носит лишь гипотетический характер.

Анализ данных, полученных в режимах подъема и сброса давления, позволил качественно установить связь между поведением МС и наблюдаемым гистерезисом на зависимостях $R(P)$. При $P=16$ ГПа в композите наблюдается положительное МС (рис. 3а). Похожее положительное МС в $Cd_3As_2 + 44.7$ мол. % $MnAs$ при сравнительно небольшом давлении, которое объяснялось конкуренцией между влиянием силы Лоренца и спин-зависимого рассеяния носителей заряда на $MnAs$ кластерах, и это положительное МС по видимому распространяется до давлений 16 ГПа, однако, его величина постепенно понижается. Дальнейший рост давления приводит к смене знака МС, и максимальная величина отрицательного МС $\sim 12\%$ регистрируется в окрестности 38 -42 ГПа и около 50 ГПа в поле 1 Т (рис. 3а и рис. 4). Следует заметить, что в давления 20-30 ГПа происходит резкое изменение темпа dR/dP на зависимости $R(P)$ (рис.2).

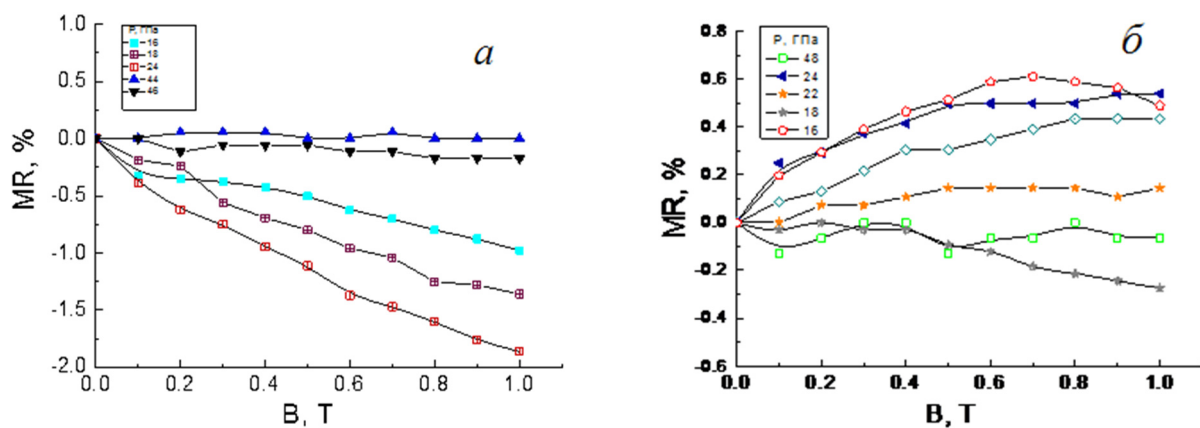
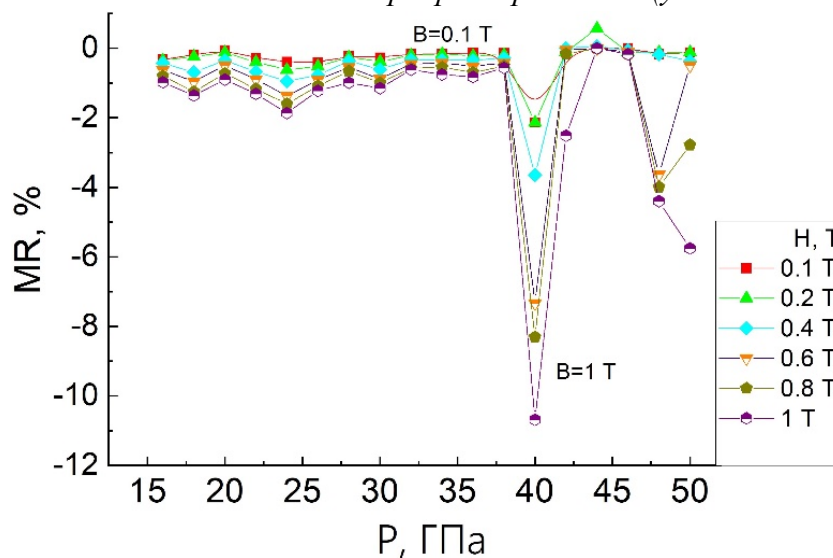


Рис. 3 – Зависимости магнитосопротивления $Cd_3As_2+44.7$ мол. % $MnAs$ от индукции магнитного поля при некоторых (не для всех, указанных в легенде давлениях) фиксированных значениях давления: а) и б) - соответственно при увеличении и уменьшении

При росте давления во всей исследованной барической области наблюдали отрицательное МС. Максимум отрицательного МС проявляется в области давлений 36-40 ГПа (рис. 4). При дальнейшем увеличении давления до максимального имеет место наличие нескольких экстремумов на кривой $\Delta R/R_0(P)$. В режиме сброса давления от 50 ГПа барическая зависимость $\Delta R/R_0(P)$ характеризуется инверсией знака МС: при давлении около 40 ГПа отрицательное МС сменяется положительным, и в районе 20 ГПа наблюдается максимальное значение положительного МС. Таким образом, смена знака МС в процессе увеличения и дальнейшего уменьшения давления может указывать на то, что в композите $Cd_3As_2 + 44.7$ мол. % $MnAs$ имеет место необратимость структурных свойств, обусловленная частичным разложением материала после декомпрессии. В то же время наличие максимумов отрицательного и положительного МС

предположительно связано с природой фазовых превращений в электронной подсистеме матрицы Cd_3As_2 исследуемого композита.

Рисунок 4 – Зависимости магнитосопротивления композитов $\text{Cd}_3\text{As}_2+44.7$ мол.% MnAs от давления при фиксированных (указанных около фигур-



маркеров) значениях индукции поперечного магнитного поля: а) и б) – соответственно увеличение и уменьшение давление

- [1] Crassee I., Sankar R., Lee L. [et al.]. 3D Dirac semimetal Cd_3As_2 : a review of material properties // Phys. Rev. Materials. – 2018. – V. 2. – P. 92-105.
- [2] Z. Wang, H. Weng, Q. Wu, X. Dai, Z. Fang, Phys. Rev. B **88**, 125427 (2013).
- [3] S. Borisenko, Q. Gibson, D. Evtushinsky, V. Zabolotnyy, B. Buchner, R.J. Cava, Phys. Rev. Lett. **113**, 027603 (2014).
- [4] J. Feng, Yu.Pang, D. Wu, Zh. Wang, H. Weng, Ji. Li, X. Dai, Zh. Fang, Y. Shi, and L. Lu, Phys. Rev. B, **92**, 081306(R) (2015).
- [5] А.И. Риль, А.В. Кочура, С.Ф. Маренкин. Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии **7**, 120 (2017).
- [6] L.F. Vereshchagin, E.N. Yakovlev, B.V. Vinogradov, G.N. Stepanov, K.Kh. Bibaev, T.I. Alaeva, V.P. Sakun. High Temperatur.–High Press. **6**, 499 (1974).
- [7] A.N. Babushkin, G.I. Pilipenko, F.F. Gavrillov. J. Phys.: Condens. Matter. **5**, 8659 (1993).
- [8] A.N. Babushkin. High Press. Res. **6**, 349 (1992).
- [9] Lanpo He, Yating Jia, Sijia Zhang, Xiaochen Hong, Changqing Jin and Shiyan Li, Quantum Materials **1**, 16014 (2016).

Динамическая спиновая инжекция и управление спиновой поляризацией в гибридной структуре полупроводниковая квантовая яма – магнитная примесь

Манцевич В.Н.¹, Маслова Н.С.¹, Рожанский И.В.², Аверкиев Н.С.²

¹ МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

e-mail: vmantsev@gmail.com

² ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Идея управления спиновой поляризацией в полупроводниковых наноструктурах получила значительное развитие после того, как технологические возможности позволили формировать гибридные структуры на базе квантовых ям, отделенных туннельным барьером от узкого магнитного слоя [1,2]. Такие структуры позволяют сохранять транспортные и оптические свойства квантовых ям, а также управлять спиновой поляризацией в яме за счет присутствия магнитного слоя, приводящего к эффектам спин-зависимого туннелирования между ямой и слоем. Ярким экспериментальным подтверждением влияния магнитного слоя на состояние носителей в квантовой яме является наблюдение циркулярной поляризации фотолюминесценции из квантовой ямы в магнитном поле [3].

Физическое явление, которое обсуждается в данной работе, заключается в возникновении спиновой поляризации носителей заряда в квантовой яме за счет спин-зависимого ухода носителей через туннельный барьер между квантовой ямой и магнитным слоем. Такие процессы без учета кулоновских корреляций на магнитном примесном состоянии были подробно рассмотрены в работе [4]. Однако, для полноценного описания процессов динамической генерации спиновой поляризации в гибридных структурах требуется учет роли кулоновских корреляций, которые могут приводить к увеличению расщепления между спиновыми уровнями примесного состояния, что вызывает возрастание спиновой поляризации носителей заряда, остающихся в квантовой яме. Кроме того, наличие на примесном состоянии кулоновских корреляций приводит к увеличению характерных времен релаксации носителей заряда в квантовой яме, поскольку напрямую влияет на процессы туннелирования между квантовой ямой и магнитным примесным состоянием [5].

Выполненный анализ формирования динамической спиновой поляризации в гибридной структуре полупроводниковая квантовая яма – магнитное примесное состояние позволил предложить несколько новых механизмов сверхбыстрого переключения спиновой поляризации [6,7,8]. Первый механизм обусловлен воздействием Лазерного импульса, который создает неравновесное распределение неполяризованных электронов в квантовой яме [6]. Изменение частоты возбуждающего лазерного импульса

в диапазоне между значениями расщепленных по спину уровней энергии магнитного примесного состояния приводит к последовательному резонансному туннелированию электронов проводимости с выделенным направлением спина из квантовой ямы на примесное состояние. В результате, в процессе рекомбинации носителей в квантовой яме формируется циркулярная поляризация сигнала фотолюминесценции. Второй механизм обусловлен формированием в запрещенной зоне квантовой ямы отщепленных состояний, положением которых можно управлять за счет приложения к системе напряжения смещения [7,8].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 23-72-10008.

- [1] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, Y. Iye. *Appl. Phys. Lett.*, 69 (3), 363 (1996)
- [2] T. Dietl, H. Ohno. *Rev. Mod. Phys.*, 86, 187 (2014).
- [3] B.A. Aronzon, M.A. Pankov, V.V. Rylkov, E.Z. Meilikhov, A.S. Lagutin, E.M. Pashaev, M. A. Chuev, V.V. Kvardakov, I.A. Likhachev, O.V. Vihrova, A.V. Lashkul, E. Lahderanta, A.S. Vedenev, P. Kervalishvili. *J. Appl. Phys.*, 107 (2), 023905 (2010)
- [4] I.V. Rozhansky, K.S. Denisov, N.S. Averkiev, I.A. Akimov, E. Lahderanta, *Phys. Rev. B*, 92, 125428 (2015).
- [5] N.S. Maslova, I.V. Rozhansky, V.N. Mantsevich, P.I. Arseyev, N.S. Averkiev, E. Lahderanta, *Phys. Rev. B*, 97, 195445 (2018).
- [6] V.N. Mantsevich, I.V. Rozhansky, N.S. Maslova, P.I. Arseyev, N.S. Averkiev, E. Lahderanta, *Phys. Rev. B*, 99, 115307 (2019).
- [7] I.V. Rozhansky, V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, P.I. Arseyev, N.S. Averkiev, E. Lahderanta, *Phys. Rev. B*, 101, 045305 (2020).
- [8] I.V. Rozhansky, V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, P.I. Arseyev, N.S. Averkiev, E. Lahderanta, *Physica E: Low dimensional systems and nanostructures*, 132, 114755 (2021).

Структура и динамика связанных магнитных вихрей в спин-трансферном наноосцилляторе

Екомасов Е.Г.¹, Звездин К.А.², Антонов Г.И.¹, Филиппова В.В.¹

¹ Уфимский университет науки и технологий. Уфа, Россия

e-mail: EkomasovEG@gmail.com

² Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

e-mail: konstantin.zvezdin@gmail.com

В настоящее время одним из перспективных технических устройств для спинтроники, является микроволновой спин-трансферный наноосциллятор (СТНО) [1-2]. В его основе обычно лежат мультислойные наностолбики, которые имеют два пермалловых магнитных слоя различной толщины, разделенных немагнитной прослойкой [2]. В магнитных слоях может существовать, как основное состояние, магнитный вихрь. Появилось много работ, посвященных исследованию вихревых СТНО, когда вихрь существует в каждом из магнитных слоев (см., например, [2]). Показано, что для системы из двух взаимодействующих магнитостатически магнитных вихрей, динамика вихрей может кардинально измениться по сравнению с одновихревым СТНО. Также экспериментально показана возможность отдельного переключения полярности каждого из вихрей при совместном приложении магнитного поля и спин поляризованного тока.

Исследуемые в данной работе СТНО имеют магнитные слои из пермаллоя толщиной 4 нм и 15 нм (содержащие магнитные вихри), разделенные немагнитной прослойкой меди разной толщины. С помощью численного решения обобщенного уравнения Ландау-Лифшица изучена динамика двух магнитостатически связанных магнитных вихрей под действием внешнего магнитного поля и спин-поляризованного электрического тока. Численный расчет динамики магнитостатически связанных вихрей проводился с использованием пакета программ для микромагнитного моделирования SpinPM. Для СТНО малого диаметра изучены: динамическое изменение вихревой структуры, формирование вихревого состояния С-структуры и краевых вихрей, траектория движения и время выхода на различные динамические режимы [3]. Было найдено время выхода вихрей на различные динамические режимы. Показана возможность динамической генерации радиальных краевых вихрей без наличия поля Дзялошинского или внешнего неоднородного магнитного поля. Показано, что вихрь в толстом магнитном слое может быть генератором спиновых волн в тонком магнитном слое с регулируемой частотой колебаний.

Рассмотрено влияние изменения толщины немагнитной прослойки на связанную динамику вихрей на примере СТНО малого диаметра [4].

Показано, что при увеличении толщины немагнитной прослойки наблюдается уменьшение величины критических токов, а диапазон токов, при котором наблюдается стационарный режим связанных колебаний вихрей, увеличивается.

Также исследован процесс переключения полярности магнитных вихрей при совместном воздействии спин-поляризованного тока и внешнего магнитного поля на СТНО большого диаметра [5]. Построена диаграмма зависимости от величины спин поляризованного тока величины магнитного поля, разделяющего полярность вихря в магнитных слоях спин-трансферного наноосциллятора. Показано, что для отдельного переключения полярности вихрей в СТНО большого диаметра требуется использования меньшей величины магнитного поля по сравнению со случаями среднего и малого диаметров СТНО, что более выгодно с точки зрения практических приложений.

Для СТНО большого диаметра так же исследовано влияние большого спин-поляризованного тока на связанную динамику вихрей в СТНО диаметром 400 нм. Обнаружено, что при увеличении величины тока выше ранее изученного диапазона, существует новый стационарный режим стационарной динамики П-вихрей. При дальнейшем увеличении величины тока опять наблюдается режим перехода начальных П-вихрей в АП-вихри с дальнейшим выходом на новый стационарный режим колебаний. Построена диаграмма зависимости от величины спин поляризованного тока частоты и радиуса стационарных связанных колебаний магнитных вихрей в спин-трансферном наноосцилляторе. Исследовано динамическое изменение структуры вихрей. Найденный эффект можно использовать для повышения рабочих частот СТНО.

В. В. Ф. выражает благодарность за финансовую поддержку Государственного задания Российской Федерации Выполнение научных исследований лабораториями (№ 075-03-2021-193/5 от 30.09.2021).

- [1] Звездин А.К., Звездин К.А., Хвальковский А.В УФН **178**, 436 (2008).
- [2] Екомасов А.Е., Звездин К.А., ФММ **123**, 3, 219 (2022).
- [3] Stepanov S.V., Nazarov V.N., Zvezdin K.A., Ekomasov E.G. JMMM **562**, 169758 (2022).
- [4] Mukhamadeeva V. V., Stepanov S. V., Zvezdin K. A., Ekomasov E. G. , Letters on Materials **12** (4), 327 (2022).
- [5] Екомасов Е.Г., Степанов С.В., Звездин К.А., Пугач Н.Г., Антонов Г.И. ФММ **122**, 3, 212 (2021).

Влияние магнитного поля на термоэлектрические и резистивные характеристики твердых растворов $\text{Re}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ в области магнитных и электронных переходов

Аплеснин С.С., Харьков А.М., Ситников М.Н.
Сибирский государственный университет науки и технологий
имени академика М. Ф. Решетнева, Красноярск, Россия
e-mail: apl@iph.krasn.ru

Термоэлектрические и магнитотранспортные эффекты представляют интерес как с практической, так и с фундаментальной точки зрения. В антиферромагнитном полупроводнике в халькогенидах марганца с неизовалентным замещением возможно образование двух и трехвалентных ионов марганца, что приведет к электронному фазовому расслоению типа ферронов. Ферроны существуют в парамагнитной области выше температуры Нееля. Гетеровалентное замещение часто сопровождается зарядовым упорядочением в зависимости от концентрации замещения или локальной электрической поляризацией, которую можно переключать магнитным полем [1]. В области магнитного фазового перехода возможно усиление диффузии ферронов.

Исследовалась кристаллическая структура поликристаллов $\text{Mn}_{1-x}\text{Sm}_x\text{S}$ и микроструктура на электронном микроскопе Hitachi SU3500. Электросопротивление измерено четырехзондовым методом на приборе Agilent 34410A в интервале температур 80-500 К. На рисунке 1а представлена температурная зависимость электросопротивления для $\text{Mn}_{1-x}\text{Sm}_x\text{S}$.

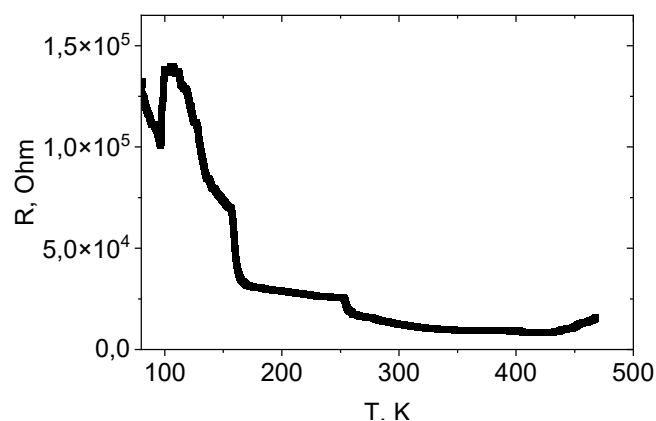


Рис. 1 Температурная зависимость электросопротивления для $\text{Mn}_{0,9}\text{Sm}_{0,1}\text{S}$.

Сопротивление в $\text{Mn}_{1-x}\text{Sm}_x\text{S}$ обнаруживает ряд аномалий. В магнитоупорядоченной области наблюдается максимум при 102 К. Температурный коэффициент сопротивления $(dR/dT)1/R$ имеет несколько максимумов при $T = 133$ К, 161 К и 253 К. Первый максимум связан с рассеянием на магнонах и образованием спиновых поляронов в окрестности

температуры Нееля $T_N = 140$ К. В результате sd - взаимодействия дырка связана с локализованным спином и возникает эффективное притяжение дырки к узлу решетки. При понижении температуры $T = 103$ К спиновый полярон пиннигуется и возможно при этой температуре решетка деформируется в результате магнитоупругого взаимодействия. Резкий рост сопротивления при 253 К вызван образованием решеточного полярона и его пиннигованием при 161 К, что должно привести к деформации решетки, которое наблюдалось в MnS при 165 К.

Типы носителей тока найдем из Холловских измерений в магнитном поле $H = 12$ кЭ, на постоянном токе 10 мкА. Положительный знак R_H указывает, что носителями тока являются дырки в интервале 80-400 К.

Существование решеточных поляронов подтверждается из ИК спектров, изображенных на рисунке 2.

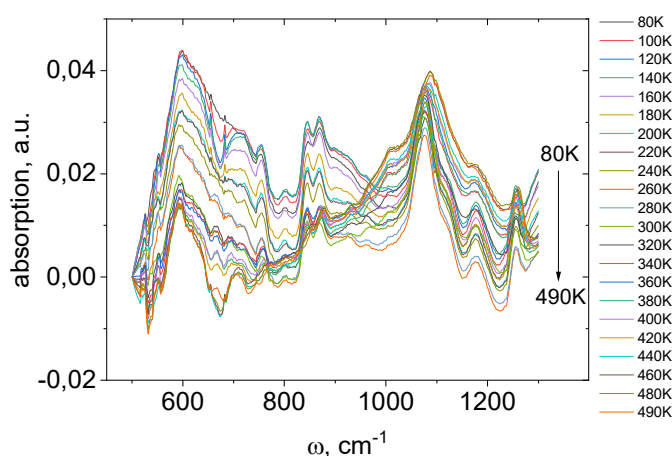


Рис. 2 Спектр ИК поглощения для $Mn_{0.9}Sm_{0.1}S$.

При малых концентрациях ионов самария существуют кластеры Mn-Sm-Mn, в которых ионы самария окружены только ионами марганца. Поэтому можно выделить октаэдры с ионами самария, которые имеют три полосы поглощения в интервале $590-600$ cm^{-1} , в области $846-870$ cm^{-1} и в $1070-1080$ cm^{-1} . Мода в $1070-1080$ cm^{-1} рассматривается как Ян-Теллеровские поляроны по аналогии с манганитами $La_{0.9}Sr_{0.1}MnO_3$. В ионах самария в t_{2g} оболочке имеется один электрон, который может приводить к образованию вибронной связи.

Найдено время релаксации носителей тока из частотных зависимостей импеданса. Обнаружены аномалии времени релаксации в области магнитных и электронных переходов. Активная часть импеданса $Mn_{0.7}Sm_{0.3}S$ (рисунок 3) обнаруживает два максимума и максимум магнитосопротивления в окрестности перехода в антиферромагнитное состояние.

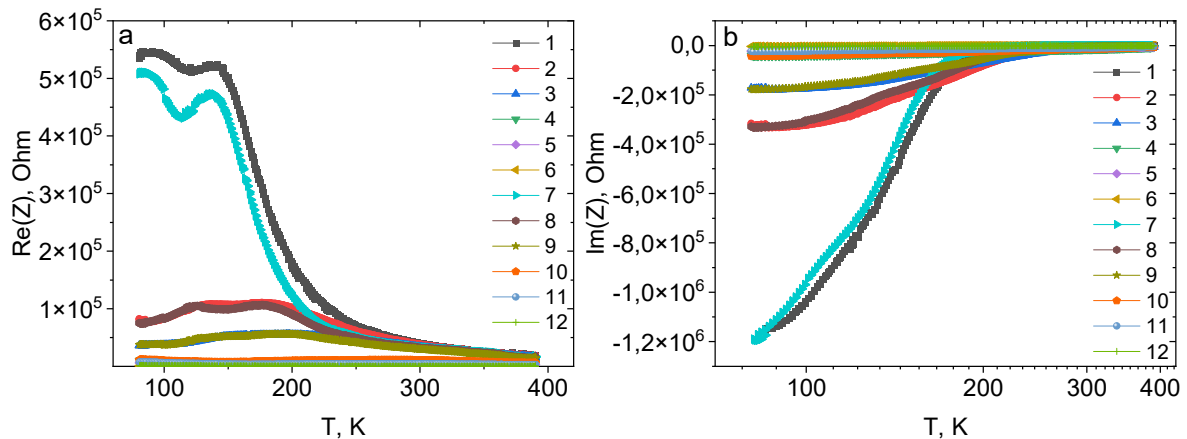


Рис. 3 Температурная зависимость активной (а) и реактивной (б) части импеданса для $Mn_{0.7}Sm_{0.3}S$ без поля на частотах $\omega = 1$ кГц (1), 5 кГц (2), 10 кГц (3), 50 кГц (4), 100 кГц (5), 1000 кГц (6) и в магнитном поле $H = 12$ кЭ на $\omega = 1$ кГц (7), 5 кГц (8), 10 кГц (9), 50 кГц (10), 100 кГц (11), 1000 кГц (12).

Термоэдс также обнаруживает максимум при переходе АФМ-ПМ (рисунок 4), который смещается в магнитном поле к низким температурам.

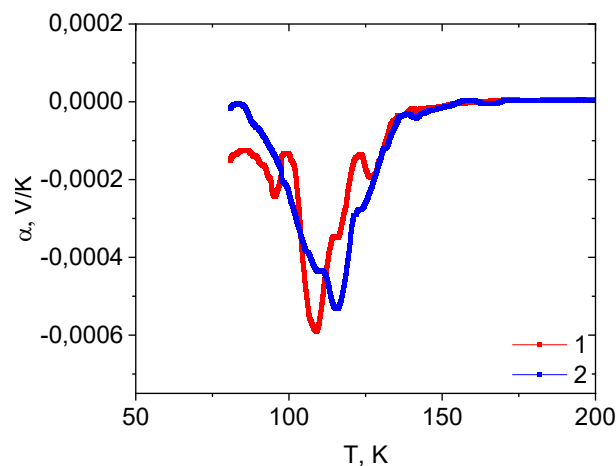


Рис. 4 Температурная зависимость коэффициента Зеебека α для $Mn_{0.7}Sm_{0.3}S$ в магнитном поле $H = 12$ кЭ (1) и без поля (2).

Зарядовое упорядочение установим из электрозвука [2]. Ультразвук увлекает носители тока и приводит к аномалиям в окрестности магнитного и зарядового упорядочения.

Итак, аномалии резистивных характеристик, термоэдс, магнитоимпеданса и электрозвука в области магнитного и зарядового упорядочения обусловлены спиновыми и решеточными поляронами. Возможно, дает вклад диффузия ферронов.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-22-10016, Красноярского краевого фонда науки.

[1] O.B. Romanova, et. al. Sol. St. Comm. **364**, 115134 (2023).

[2] S.S. Aplesnin, et. al. Eur. Phys. J. Plus **137**, 226 (2022).

Исследование SmCo/Fe гетероструктуры в сильных магнитных полях

Тaaев Т.А.¹, Хизриев К.Ш.¹, Горев Р.В.², Скороходов Е.В.² Караштин Е.А.²,
Муртазаев А.К.¹

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, 367015, Махачкала, Россия

²Институт физики микроструктур РАН, 603950, Нижний Новгород, Россия
e-mail: taaev89@mail.ru

В 1991 году был предложен альтернативный вариант для увеличения максимального энергетического произведения $(BH)_{max}$: изготовления композитных материалов с чередующимися магнитотвердыми и магнитомягкими слоями [1]. Помимо увеличения $(BH)_{max}$ [2] в таких гетероструктурах было открыто весьма интересное явление: обратимость кривой перемагничивания. Это явление получило название спиновая пружина [2-4].

Для исследования кривых перемагничивания магнитных SmCo/Fe и SmCo/Co гетероструктур был использован пакет микромагнитного моделирования MuMax3 [5]. В пакете MuMax3 для расчета динамики намагниченности используется уравнение Ландау-Лифшица-Гилберта [5]:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = \gamma \frac{1}{1 + \alpha^2} (\vec{m} \times \vec{H}_{eff} + \alpha (\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{eff}))), \quad (1)$$

где γ – гиромагнитное отношение, α – коэффициент затухания, m – вектор намагниченности и H_{eff} – эффективное поле. Эффективное поле определяется как:

$$\vec{H}_{eff} = \vec{H}_{exch} + \vec{H}_{anis} + \vec{H}_{demag} + \vec{H}_{ext} + \vec{H}_{DM} + \vec{H}_{therm}, \quad (2)$$

где H_{exch} , H_{anis} , H_{demag} , H_{ext} , H_{DM} , H_{therm} – вклад обменного взаимодействия, анизотропии, размагничивающего поля, Зеемановский вклад, взаимодействие Дзялошинского-Мории, а также вклад тепловых флуктуаций.

В нашем случае, коэффициент затухания был равен нулю и уравнение (1) переходит в уравнение для бездиссипативной среды [6]:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = \gamma (\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) \quad (3)$$

Эффективное поле в этом случае определяется как:

$$\vec{H}_{eff} = \vec{H}_{exch} + \vec{H}_{anis} + \vec{H}_{demag} + \vec{H}_{ext}, \quad (4)$$

Мы получили кривые перемагничивания SmCo/Fe гетероструктуры при различной толщине магнитных слоев, а также при различном направлении внешнего магнитного поля. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и теоретическими выкладками [2].

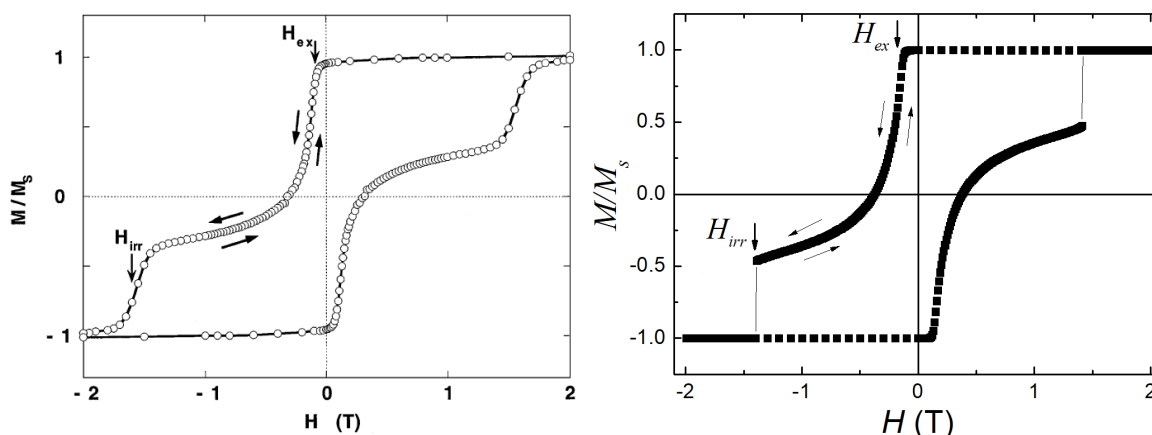


Рис.1. Петли гистерезиса намагниченности для SmCo(20нм)/Fe(20нм) гетероструктуры: слева – экспериментальная кривая, полученная при 25 К [2]; справа – результат микромагнитного моделирования.

На рисунке 1 представлены петли гистерезиса для магнитной SmCo(20нм)/Fe(20нм) гетероструктуры, полученные в ходе эксперимента [2] и проведённого нами микромагнитного моделирования, с использованием пакета MuMax3, для случая, когда внешнее магнитное поле приложено вдоль оси легкого намагничивая под углом 177° .

Для магнитотвердых/магнитомягких гетероструктур существуют два характерных значения внешнего магнитного поля H_{ex} и H_{irr} (Рис. 1), и на петле гистерезиса наблюдается обратимый участок в интервале $H_{ex} \leq H \leq H_{irr}$, на котором и возникает явление спиновой пружины. Из рисунка видно, что наши результаты очень хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными в работе [2]. Значение критического поля H_{irr} , вычисленного при микромагнитном моделировании, составило 1.4 Т.

Исследование выполнено в рамках научной программы НЦФМ (проект «Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях»).

- [1] E.F. Kneller, R. Hawig, IEEE Trans. Magn. **27**, 3588 (1991).
- [2] E.E.Fullerton, J.S. Jiang, S.D. Bader, JMMM **200**, 392 (1999).
- [3] Т.А. Тааев, К.Ш. Khizriev, А.К. Murtazaev, et.al., JMMM **524**, 167638 (2021).
- [4] Т.А. Тааев, К.Ш. Khizriev, А.К. Murtazaev, Thin Solid Films **741**, 139040 (2022).
- [5] A. Vansteenkiste, J. Leliaert, M. Dvornik, et.al., AIP Advances **4**, 107133 (2014).
- [6] Л.Д. Ландау // Собрание трудов. – М.: Наука, 1969. – Т. 1. – С. 128–143.

Экситоны и трионы с отрицательной приведенной массой в двумерных полупроводниках

Семина М.А.¹, Мамедов Д.В.², Глазов М.М.¹

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия

e-mail: semina@mail.ioffe.ru

² НИУ Высшая школа экономики, г. Санкт-Петербург, Россия

Монослои дихалькогенидов переходных металлов (MX_2) являются настоящими двумерными полупроводниками и, поэтому, привлекают значительный интерес своими необычными электронными и оптическими свойствами. В таких системах особенно сильно кулоновское взаимодействие между носителями заряда. В оптических спектрах монослоев MX_2 наблюдаются экситоны с энергией связи, составляющей сотни мэВ, и трионы – трехчастичные связанные комплексы из электрона и двух дырок или двух дырок и электрона с энергиями связи, составляющими десятки мэВ [1-4]. Такая большая энергия связи, например, делает возможным наблюдение экситонов вплоть до комнатной температуры. Крайне малая толщина монослоев MX_2 делает их оптические свойства существенно зависимыми от диэлектрического окружения вследствие важности эффектов экранировки для таких систем.

В недавних экспериментальных работах [5, 6] в монослое WSe_2 наблюдались «высоколежащие» экситоны и трионы, в которых один электрон находится в далекой (возбужденной) зоне. Особенностью зонной структуры монослоев дихалькогенидов переходных металлов является то, что эта возбужденная зона проводимости характеризуется отрицательной эффективной массой [4,5]. Это обстоятельство поднимает вопрос о теоретическом описании кулоновских комплексов с электроном с отрицательной эффективной массой.

Мы представляем результаты теоретических исследований экситонов и трионов в атомарно-тонких полупроводниках, в которых один электрон находится в возбужденной зоне проводимости с отрицательной эффективной массой, а остальные носители заряда находятся или в нижней зоне проводимости или в верхней валентной зоне, характеризующихся положительными и близкими между собой эффективными массами.

В рамках модели параболических зон был получено ограничение на соотношение между эффективными массами носителей заряда, при котором экситон и трионы могут быть стабильными. Область стабильности трионов с двумя электронами оказалась очень узкой и не соответствующей известным эффективным массам в возбужденной зоне [5, 6].

Кулоновские комплексы могут быть стабилизированы учетом непараболичности дисперсии возбужденной зоны проводимости (текущие представления о зонной структуре MX_2 говорят о том, что она может быть

существенна) в виде учета членов четвертой степени по волновому вектору. Энергии связи экситона и триона были рассчитаны вариационным методом и методом численной диагонализации матрицы гамильтониана, вычисленной на неортогональном базисе, состоящим из гауссианов [7]. Выбор пробных функций для вариационного расчета был сделан на основе аналитического расчета для короткодействующего потенциала взаимодействия между носителями заряда. Построенные пробные функции имеют небольшое число подгоночных параметров, имеющих ясный физический смысл.

Вычислены и проанализированы зависимости энергий связи экситонов и трионов как от приведенной массы высоколежащего экситона (как положительной так и отрицательной) так и от параметра, характеризующего непараболичность дисперсии возбужденной зоны проводимости. Для описания взаимодействия между носителями заряда был использован кулоновский потенциал и потенциал Рытовой-Келдыша, учитывающий особенности диэлектрического окружения. Получены асимптотики для энергий связи экситона и триона в пределах сильной непараболичности. Проанализированы отклонения экситонной серии от водородоподобной. Описаны результаты недавних экспериментов [6]. Продемонстрирована важность учета непараболичности возбужденной зоны проводимости для получения положительной энергии связи высоколежащих трионов в монослоях WSe_2 , наблюдающейся в эксперименте.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 23-12-00142).

- [1] М.В. Дурнев, М.М. Глазов, УФН 188, 913–934 (2018).
- [2] E. Courtade, M.A. Semina, et al., Phys. Rev. B 96, 085302 (2017).
- [3] G. Wang, A. Chernikov, M. M. Glazov, et al., Rev. Mod. Phys. **90**, 021001 (2018)
- [4] M. A. Semina, R. A. Suris, Physics-Uspekhi **65**, 111 (2022).
- [5] K.-Q. Lin, et al., Nature Comm. **12**, 5500 (2021).
- [6] K.-Q. Lin, M.A. Semina et al., Nature Comm. **13**, 6980 (2022).
- [7] M.A. Semina, J.V. Mamedov, M.M. Glazov, Oxford Open Materials Science, itad004, doi:10.1093/oxfmat/itad004 (2023).

Вихреподобные нанобъекты в перфорированных пленках пермаллоя

Магадеев Е.Б., Вахитов Р.М., Канбеков Р.Р.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
e-mail: vakhitovrm@yahoo.com

Вихреподобные магнитные неоднородности различного типа вызывают значительный интерес исследователей в последние годы вследствие ряда их уникальных свойств, таких как высокая подвижность, наноразмеры и топологическая защищенность [1]. В работах [2, 3] был предложен новый тип неоднородностей (см. рис. 1), формирующихся в области двух (или более) близкорасположенных перфораций, искусственно созданных в ферромагнитной пленке с сильной одноосной анизотропией типа «легкая плоскость». Такие объекты оказываются довольно привлекательными с практической точки зрения благодаря тому, что, во-первых, могут находиться в одном из по меньшей мере трех неэквивалентных состояний, а во-вторых – допускают переключение между этими состояниями под воздействием внешнего электрического тока [2, 4]. При этом, однако, требование наличия сильной кристаллической анизотропии материала, обеспечивающей отсутствие выхода вектора намагниченности из плоскости пленки, может оказаться трудновыполнимым. В этой связи в данной работе исследуется возможность отказа от легкоплоскостных ферромагнетиков в пользу пермалловых пленок, в которых отсутствие кристаллической анизотропии компенсируется наличием анизотропии формы.

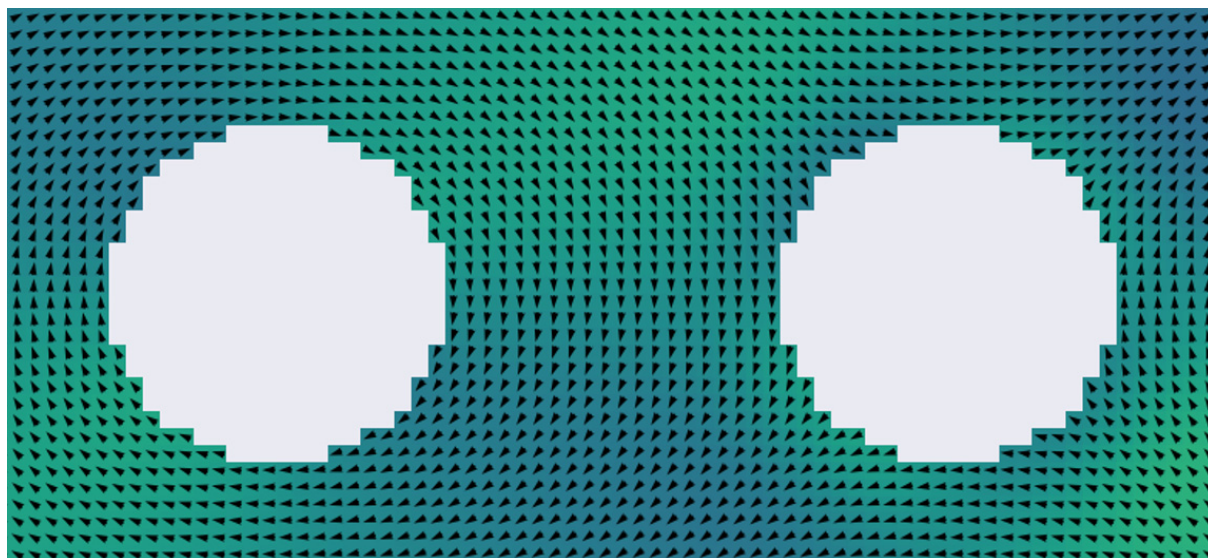


Рис. 1. Типичная структура неоднородности

В работе [5] было показано, что формирование неоднородностей изучаемого типа в окрестности антидотов радиусом R становится возможно в том случае, когда абсолютная величина константы анизотропии K превышает некоторое критическое значение K_{\min} . При этом величина $K_{\min}R^2/A$ является функцией отношения a/R (здесь A – обменный параметр, a – расстояние между центрами антидотов), которая в большинстве практически важных ситуаций принимает значения, близкие к 1. Будем полагать, что эти оценки справедливы не только для кристаллической анизотропии, но также и для анизотропии формы. Тогда в случае пермаллоя $\text{Ni}_{0.80}\text{Fe}_{0.20}$, когда эффективная анизотропия характеризуется константой $K \approx 0.43$ МДж/м³, получаем, что вихреподобные неоднородности могут локализоваться на антидотах радиусом $R = 5$ нм и более, чего вполне достаточно для разработки наноразмерных ячеек памяти на их основе.

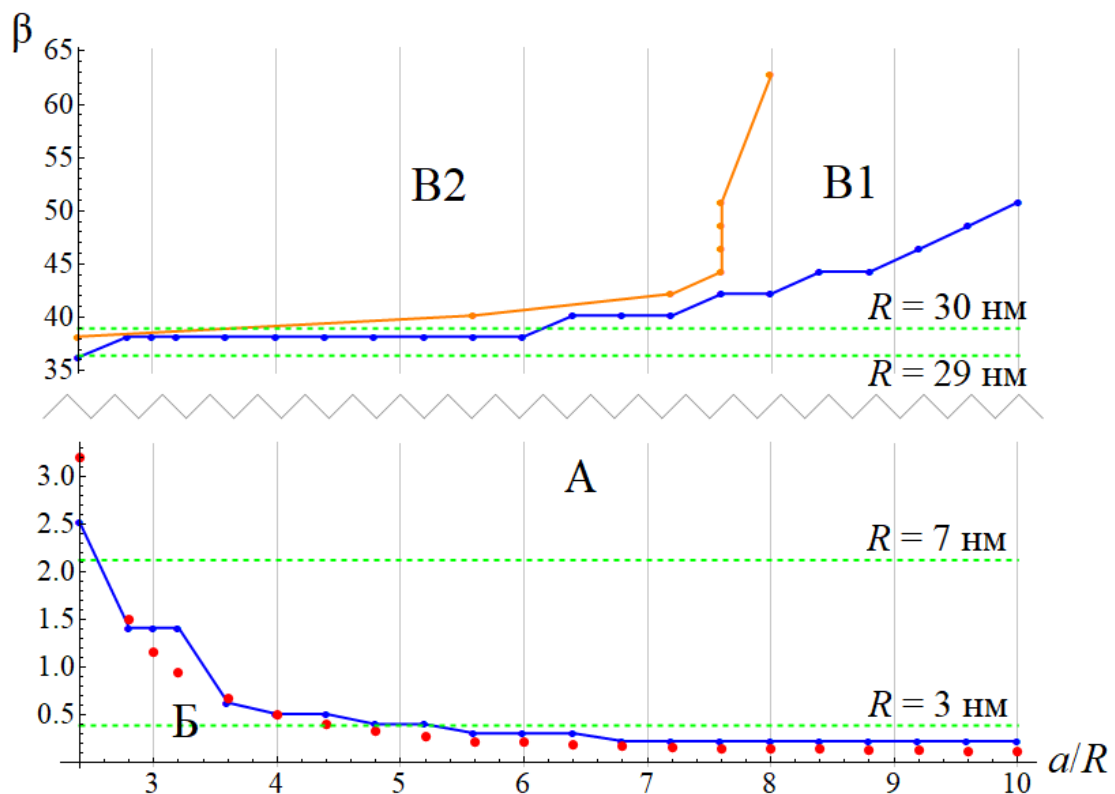


Рис. 2. Диаграмма устойчивости неоднородностей

Более детальное изучение вопроса с учетом влияния плоскостных компонент размагничивающих полей осуществлялось путем численного моделирования (в частности, в результате такого моделирования было получено распределение намагниченности, приведенное на рис. 1). На рис. 2 показана диаграмма устойчивости вихреподобных неоднородностей в осях a/R и $\beta = KR^2/A$, где под K понимается абсолютная величина константы эффективной анизотропии. Синими линиями показаны границы области «А», в которой неоднородности существуют и являются

устойчивыми. Зеленые штриховые линии отвечают значениям β в случае пленки пермаллоя с антидотами заданного радиуса R . Отсюда несложно видеть, что вихреподобные неоднородности оказываются устойчивыми при произвольных практически реализуемых значениях расстояния a , если радиус антидотов R находится в диапазоне от 7 до 29 нм.

Красными точками на рис. 2 показана нижняя граница области «А», которая наблюдалась бы в образце с анизотропией кристаллической природы [5]. Тем самым сценарий потери устойчивости при уменьшении значений K является универсальным: анизотропия становится слишком слабой, чтобы препятствовать выходу вектора намагниченности из плоскости пленки. Существование верхней границы области «А», однако, характерно исключительно для случая анизотропии формы и не может наблюдаться в образцах с кристаллической анизотропией. Переход через эту границу в направлении областей «В» означает, что размагничивающие поля становятся достаточно сильными, чтобы обуславливать замыкание магнитного потока в образце в целом. При этом возможны два сценария такого перестроения магнитной структуры. В первом случае (точки области «В1») изменяется топология самой вихреподобной неоднородности. Во втором случае (точки области «В2») топология и структура вихреподобной неоднородности сохраняются, однако в ее окрестности формируется изолированный вихрь. Из вида диаграммы несложно заключить, что при не слишком больших значениях отношения a/R доминирующим оказывается второй сценарий, связанный с появлением изолированного вихря (хотя переход из области «А» в область «В2» при непрерывном изменении материальных параметров пленки сопровождается кратковременной реализацией первого сценария). Данное обстоятельство находится в хорошем соответствии с экспериментально наблюдаемым явлением, которое заключается в увеличении концентрации изолированных вихреподобных объектов в магнитных пленках после создания в них искусственных перфораций.

- [1] K. Everschor-Sitte, J. Masell, R.M. Reeve, M. Kläui et al. *J. Appl. Phys.* 124 (24), 240901 (2018).
- [2] Е.Б. Магадеев, Р.М. Вахитов. *Письма в ЖЭТФ.* 115 (2), 123 (2022).
- [3] Е.Б. Магадеев, Р.М. Вахитов, Р.Р. Канбеков. *ЖЭТФ.* 162 (9), 417 (2022).
- [4] E. Magadeev, R. Vakhitov, I. Sharafullin. *Entropy.* 24, 1104 (2022).
- [5] E.B. Magadeev, R.M. Vakhitov, R.R. Kanbekov. *J. Phys.: Condens. Matter.* 35, 015802 (2023).

Гиперболические метаповерхности в магнитоплазмонике

Кузьмин Д.А.¹, Усик М.О.¹, Бычков И.В.¹, Шавров В.Г.³

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
e-mail: kuzminda@csu.ru

С тех пор, как начались исследования в области активной магнитоплазмоники в гибридных структурах металл-ферромагнетик, было продемонстрировано множество плазмонно-усиленных магнитооптических эффектов. Включение магнитоактивных материалов в плазмонные структуры приводит к различным магнитоплазмонным эффектам. Одним из эффектов является изменение волнового числа поверхностных плазмон-поляритонов (ППП), которое зависит от направления намагниченности, т.е. $k_{sp}(\pm M) = k_{sp}^0 + \Delta k_{sp}(\pm M)$. Ранее в гибридных многослойных структурах металл-ферромагнетик было показано, что малая модуляция $|\Delta k_{sp}(M)|/k_0 \sim 10^{-4}$, накапливаясь на большом расстоянии распространения, может приводить к заметным значениям глубины модуляции магнитоплазмонного сигнала $2|\Delta k_{sp}(M)|d \sim 0.02$ для расстояния распространения ППП $d = 22$ мкм.

Мы исследовали простейшую реализацию гиперболической плазмонной метаповерхности (ГПМ), состоящей из массива металлических (золотых) полос, отделенных друг от друга воздушной прослойкой. Такая метаповерхность находится на подложке из магнитного диэлектрика (например, YIG). Схема структуры изображена на рисунке 1.

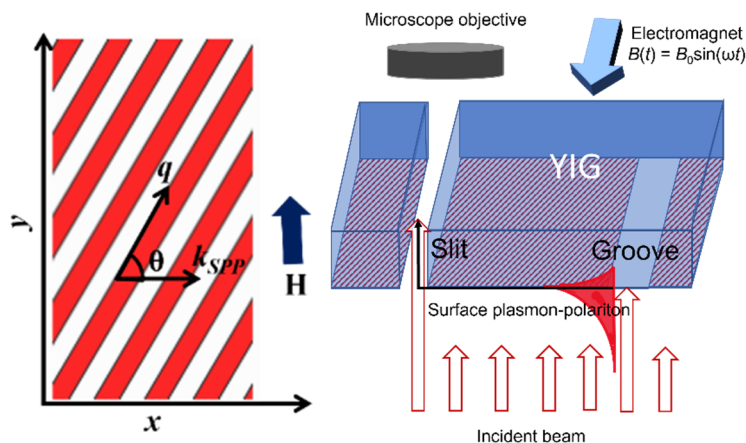


Рис. 1. Схема структуры и потенциального эксперимента для обнаружения магнитной модуляции ППП.

Дальность распространения ППП зависит от их направления относительно оси метаповерхности \mathbf{q} (она совпадает с направлением золотых полос). Чтобы оценить оптимальные экспериментальные условия для максимизации производительности магнитоплазмонных модуляторов, адекватным параметром представляется величина $(\text{Re}[\Delta k]^2 + \text{Im}[\Delta k]^2)^{1/2} \times L_{spp}$, где L_{spp} — длина затухания ППП (при которой интенсивность ППП затухает

в e раз). На рис. 2 показана угловая зависимость этой величины: она не зависит от направления распространения ППП для однородной пленки золота, а также для эллиптического режима для метаповерхностей с $W > 48$ нм. В диапазоне ГПМ, т.е. при $W < 48$ нм, она демонстрирует ярко выраженные максимумы с центром при $\theta = 0$. Уменьшение ширины золотых полос приводит к сужению пика и увеличению величины модуляции. Модуляция ППП достигает пиковых значений на порядок выше по сравнению с однородной пленкой за счет сужения своего углового диапазона.

ГПМ позволяют увеличить магнитную модуляцию ППП. Она может

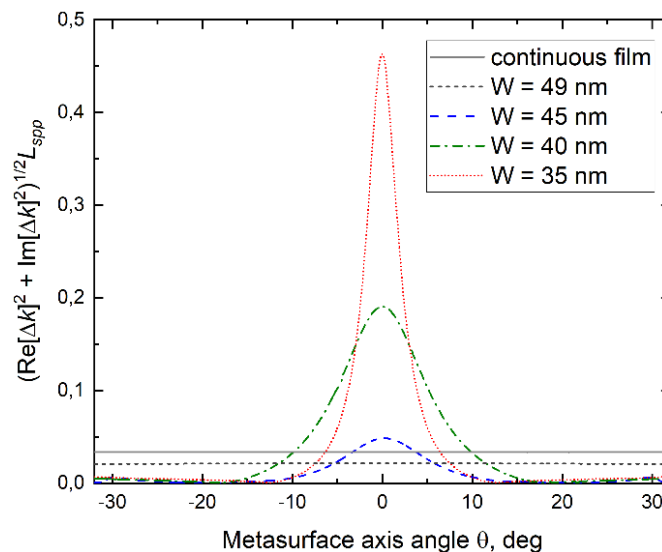


Рис. 2. Зависимость модуляции ППП $(\text{Re}[\Delta k]^2 + \text{Im}[\Delta k]^2)^{1/2} \times L_{spp}$ от направления распространения ППП относительно золотых полос показывает, что максимальная модуляция может наблюдаться при направлении ППП вдоль полос.

достигать гигантских значений, превосходя однородные плазмонные тонкие пленки и гибридные многослойные структуры металл-ферромагнетик. Модуляция плазмонных оптических свойств с помощью контроля намагниченности в ферромагнитной диэлектрической подложке предполагает прямое применение этой системы в качестве оптических переключателей. Учитывая эксперименты с фемтосекундными световыми импульсами, мы полагаем, что скорость переключения такого устройства в будущем может достичь терагерцового режима и позволить реализовать полностью оптические магнитоплазмонные переключатели.

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 22-19-00355.

Магнитосопротивление и Вольт-Амперные характеристики в $\text{Sm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$

Харьков А.М., Ситников М.Н.

Сибирский государственный университет науки и технологий
имени академика М. Ф. Решетнева, Красноярск, Россия
e-mail: khark.anton@mail.ru

Манипулирование транспортными характеристиками под действием магнитного поля [1] и электрического поля [2] представляет интерес как с фундаментальной, так и с практической точки зрения. За эффект магнитосопротивления – изменение сопротивления под действием внешнего магнитного поля присуждена Нобелевская премия [3]. Под действием магнитного поля меняется магнитная структура и в результате обменного взаимодействия с локализованными спинами меняется электронная структура.

Магнитосопротивление определялось в образцах $\text{Sm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ из Вольт-Амперных характеристик (I-V), измеренных при фиксированных температурах, на образце в виде параллелепипеда с омическими контактами в диапазоне температур 80-400 К, в магнитных полях до 12 кЭ. Электросопротивление измерено на приборе Agilent 34410А.

На рисунке 1 представлены Вольт-Амперные характеристики в образцах $\text{Sm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ с концентрацией $x = 0.1$ без магнитного поля $H = 0$ кОе и в магнитном поле $H = 12$ кОе, направленном по току и перпендикулярно току. Зависимость тока от напряжения не является линейной. Слабая нелинейность связана с электрически неоднородным состоянием в образце.

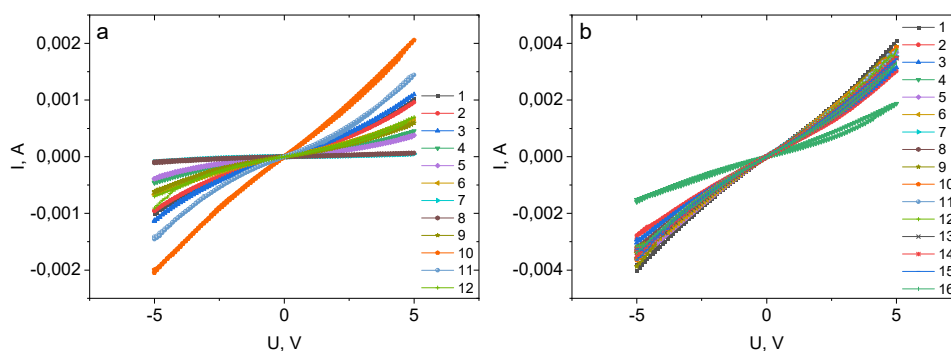


Рис. 1 I-V характеристика в образцах $\text{Sm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ с концентрацией $x = 0.1$, без магнитного поля $H = 0$ кОе (1,4,7,10) и в магнитном поле $H = 12$ кОе для 270° (2,5,8,11) и для 360° (3,6,9,12) при $T = 80\text{K}$ (1,2,3), 120K (4,5,6), 160K (7,8,9), 200K (10,11,12) (a); И без магнитного поля $H = 0$ кОе (1,3,5,7,9,11,13,15) и в магнитном поле $H = 12$ кОе для 270° (2,6,10,14) и для 360° (4,8,12,16) при $T = 240\text{K}$ (1,2,3,4), 280K (5,6,7,8), 320K (9,10,11,12), 390K (13,14,15,16) (b).

Из I-V характеристик найдена зависимость магнитосопротивления от напряжения внешнего электрического поля, изображенного на рисунке 2.

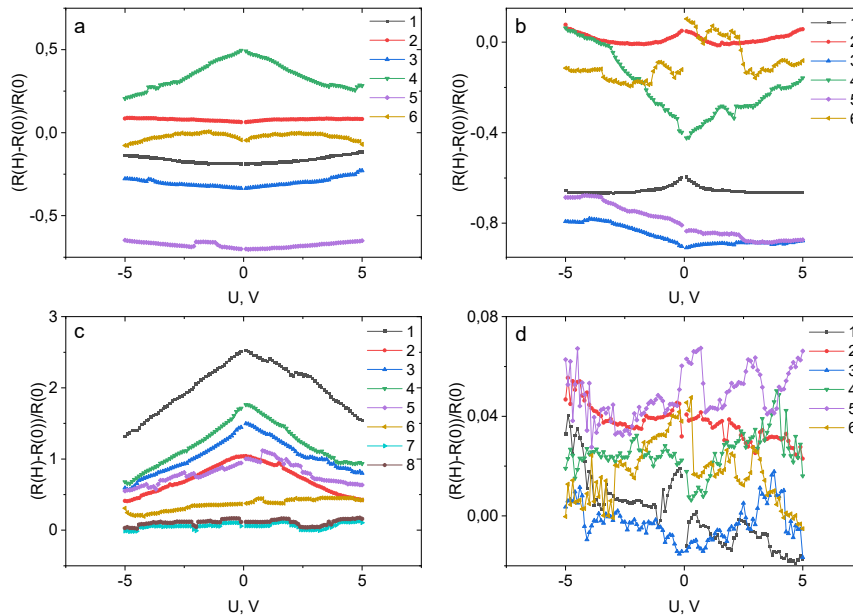


Рис. 2 Магнитосопротивление в поле $H = 12 \text{ kOe}$ в зависимости от электрического напряжения в образцах $\text{Sm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ с концентрацией $x = 0.1$, для 0° (1,3,5,7) и 90° (2,4,6,8) при $T = 80\text{K}$ (1,2), 100K (3,4), 120K (5,6) (a); при $T = 140\text{K}$ (1,2), 160K (3,4), 180K (5,6) (b); при $T = 200\text{K}$ (1,2), 220K (3,4), 240K (5,6), 280K (7,8) (c); при $T = 320\text{K}$ (1,2), 360K (3,4), 390K (5,6) (d).

Сопротивление уменьшается в магнитном поле, если поле направлено вдоль тока и зависит от тока или напряжения в магнитоупорядоченной области. С ростом электрического поля магнитосопротивление уменьшается на 30% при 80 К, 100 К и на 7% при 120 К. Изменение магнитосопротивления по температуре достигает максимума в интервале 180-200 К. Так сопротивление уменьшается в магнитном поле от 18% при 80 К до 90% при 180 К. Выше 180 К сопротивление резко растет в магнитном поле и достигает $(R(H)-R(0))/R(0)=2,5$ при $T = 200 \text{ K}$. Нагрев и увеличение тока приводят к уменьшению магнитосопротивления и в области комнатных температур магнитосопротивление достигает порядка одного процента. Возможно, существует критический ток, при котором исчезает зависимость сопротивления от магнитного поля.

Зависимость сопротивления качественно меняется от магнитного поля, направленного перпендикулярно току. В антиферромагнитном состоянии сопротивление растет и достигает 50% при $T = 100\text{K}$. В парамагнитной области в интервале 160-180 К сопротивление уменьшается на 20-40% при увеличении тока и выше комнатной температуры возрастает на несколько процентов за счет Холловского вклада.

Итак, в сульфиде марганца, замещенного самарием $\text{Sm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$, наблюдается угловая зависимость магнитосопротивления, которая увеличивается на порядок в области магнитного фазового перехода. Обнаружена слабая нелинейность Вольт-Амперных характеристик $\text{Sm}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$. Найдено уменьшение сопротивления в интервале 80-180 К и резкое увеличение выше 200 К если магнитное поле направлено вдоль тока. Установлен рост магнитосопротивления в магнитоупорядоченной области, если поле направлено перпендикулярно току. Магниторезистивный эффект резко уменьшается в области комнатных температур и достигает несколько процентов. Магнитосопротивление объясняется за счет изменения внешнего давления на образец.

Работа была поддержана Российским научным фондом, Правительством Красноярского края и проектом Красноярского научного фонда № 23-22-10016.

- [1] P. Lin, C. Li, Z. Wang, et. al., Nat. Electron. **3**, 225 (2020).
- [2] R. Niu, W.K. Zhu, J. Phys.: Condens. Matter **34**, 113001 (2022).
- [3] A. Fert, I.A. Campbell, J. Phys. F **6**, 849 (1976).

Влияние слабых магнитных полей на СВЧ отражающие свойства пленок Fe_2O_3 и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$

Антонец И.В.

*Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина,
Сыктывкар, Россия
e-mail: aiv@mail.ru*

В работе представлены результаты экспериментальных исследований воздействия магнитных полей с индукцией до 0.3 Тл на коэффициент отражения СВЧ излучения пленок с составами Fe_2O_3 и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$. Магнитные пленки толщиной около 65 мкм получены методом ионно-лучевого напыления на подложку из лавсана. Исследована топография поверхности и элементный состав пленок. Приведены частотные зависимости коэффициента отражения СВЧ волн в диапазоне 8–12 ГГц. Показано, что воздействие магнитного поля на различных частотах позволяет не только изменять максимальное значение коэффициента отражения, но и выравнивать максимумы и минимумы отражения, возникающие при отсутствии поля.

Магнитные пленки получены методом ионно-лучевого напыления при неглубоком вакууме $7.8 \cdot 10^{-5}$ Торр на подложку из лавсана.

Топография поверхности, элементный состав и толщина пленок определялись с помощью электронного микроскопа Tescan MIRA 3 LMN SEM (Чехия). Толщина фиксировалась по электронно-микроскопическим изображениям торца скола магнитной пленки.

Толщина образцов составляла 65.60 мкм для пленок Fe_2O_3 и 64.92 мкм для пленок $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$. При этом толщина магнитного слоя оценивалась в 0.80 мкм и 0.75 мкм, соответственно.

Количественное определение элементного состава поверхности пленок осуществлялось при помощи рентгеновской энергодисперсионной спектроскопии (разрешение на линии $\text{Mn K}\alpha$ — 127 эВ).

Результаты исследований выявили следующий состав магнитных пленок: Fe_2O_3 (Fe~38.44 ат. %, O~61.56 ат. %) и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ (Co~7.85 ат. %, Fe~25.98 ат. %, O~66.17 ат. %). Содержание металлической фазы — 38.44 ат. % и 33.83 ат. %, соответственно.

Диэлектрическая проницаемость образцов определялась методом Q-метра при помощи измерителя добротности Tesla VM-560. На частоте резонанса 259 кГц диэлектрическая проницаемость пленок Fe_2O_3 составила 6.91, а для пленок $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ — 3.88. Диэлектрическая проницаемость подложки из лавсана — 3.10.

Электрическое сопротивление образцов оценивалось четырехзондовым методом при помощи мультиметра Agilent 34401A. Для пленок Fe_2O_3 сопротивление составило 50.75 МОм, удельная проводимость

— 17.28 нСм/м. Для пленок $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ сопротивление превысило предельно допустимое измеряемое значение прибора 100 МОм, удельная проводимость еще меньше, чем для пленок Fe_2O_3 . Полученные результаты свидетельствуют о полупроводниковых свойствах образцов.

На рис. 1,2 приведена микроструктура поверхности пленок Fe_2O_3 (рис. 1) и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ (рис. 2).

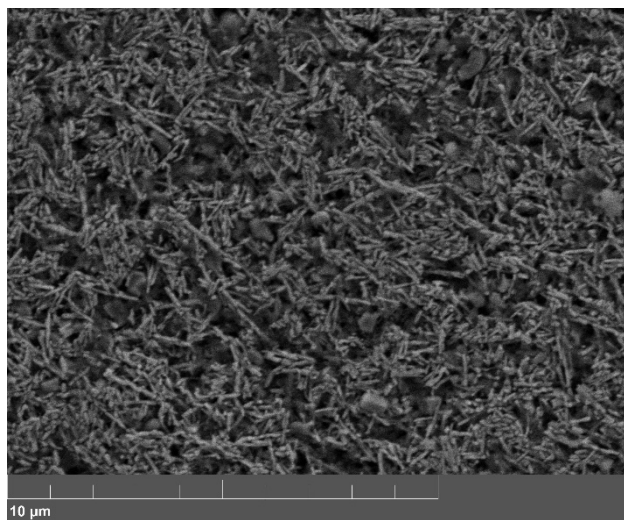


Рис. 1. Топография поверхности пленки Fe_2O_3

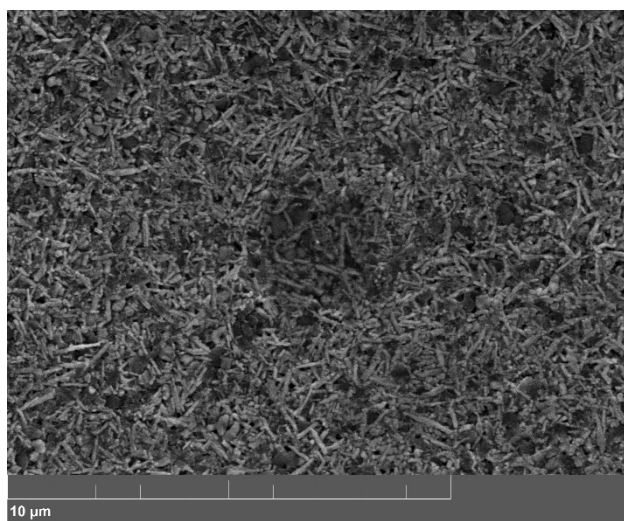


Рис. 2. Топография поверхности пленки $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$

генератор качающейся частоты ГКЧ 61, индикатор коэффициента стоячих волн (КСВН) и ослабления сигнала ЯЗР-67, волноводный комплект рефлектометров — направленных выделителей сигналов. Подробнее методика измерения структурных и отражающих характеристик пленок описана в работах [1–3].

Для воздействия магнитного поля на коэффициент отражения СВЧ волн, часть волновода с магнитной пленкой помещалась в зазор

Как видно из рисунков, магнитные пленки представляют собой неупорядоченно расположенные скругленные частицы палочкообразной формы длиной до 1–2 мкм и диаметром около 70–100 нм, обособленные объемные частицы эллипсоидальной и трапецеидальной формы размером до нескольких сотен нанометров, а также поры. Структура пленок состоит из большого числа таких частиц, разделенных пустотами со средними размерами около 0.5 мкм. Как показали предварительные исследования, пленки с подобной структурой характеризуются малым коэффициентом отражения СВЧ волн. Более 90 % СВЧ излучения проходит через пленки.

СВЧ коэффициент отражения от магнитных пленок при нормальном падении волны измерялся в диапазоне частот 8–12 ГГц. Для исследований использовалась измерительная установка, включающая в себя

электромагнита, индукция магнитного поля в котором изменялась от 0 до 0.30 Тл с шагом 0.05 Тл. Магнитное поле было направлено вдоль плоскости пластины. Все исследования проведены при комнатной температуре.

На рис. 3, 4 приведены зависимости коэффициента отражения СВЧ волн в диапазоне 8–12 ГГц для пленок Fe_2O_3 (рис. 3) и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ (рис. 4)

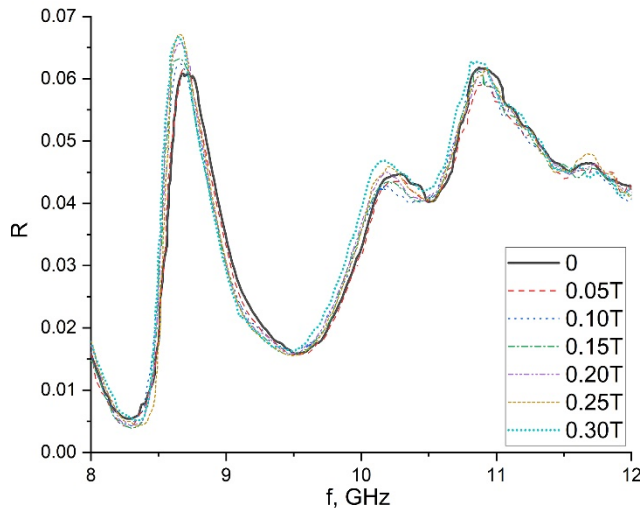


Рис. 3. Зависимости коэффициента отражения от частоты для пленок Fe_2O_3 при воздействии магнитного поля с индукцией от 0 до 0.3 Тл

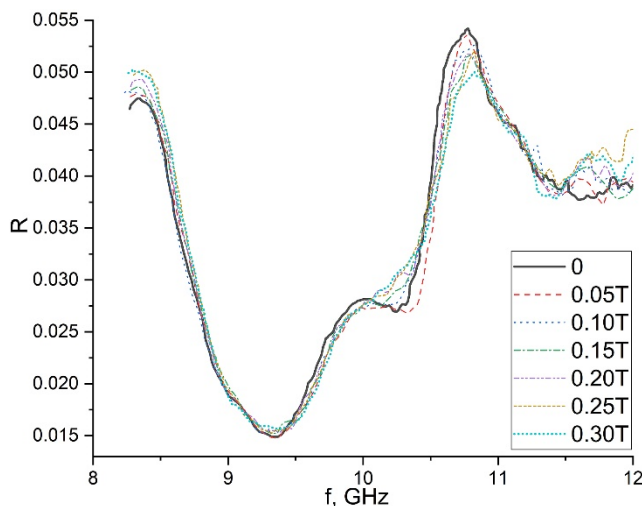


Рис. 4. Зависимости коэффициента отражения от частоты для пленок $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ при воздействии магнитного поля с индукцией от 0 до 0.3 Тл.

при воздействии слабых магнитных полей с индукцией от 0 до 0.3 Тл.

При отсутствии магнитного поля для каждой из пленок обнаружены три выраженных максимума отражения в указанном диапазоне частот. Причем для пленок $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ их положения смещены в сторону меньших частот относительно положений максимумов для пленок Fe_2O_3 , а величина этого смещения уменьшается с ростом частоты. Как видно из рис. 3, 4 максимальный коэффициент отражения для обеих пленок незначителен и составляет около 5–6 % от всего падающего излучения.

Для пленок Fe_2O_3 (рис. 3) при увеличении индукции магнитного поля основные пики отражения несколько сдвигаются в сторону меньших частот, а коэффициент отражения при этом возрастает. Так для магнитного поля с индукцией 0.25–0.30 Тл максимум отражения составляет 0.067 на частоте 8.65 ГГц и 0.063 на частоте 10.85 ГГц.

При воздействии на пленку $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ постоянным магнитным полем (рис. 4), коэффициент отражения в первом максимуме возрастает с 0.047 до 0.050 на частоте 8.30 ГГц, подобно зависимостям, представленным на рис. 3. Однако в дальнейшем характер поведения коэффициента отражения СВЧ волн меняется. С увеличением индукции

магнитного поля до 0.25–0.30 Тл максимум на частоте 10.00 ГГц и последующий за ним минимум на частоте 10.30 ГГц, практически выравниваются, и наблюдается монотонный рост коэффициента отражения. За счет этого следующий пик отражения сдвигается в сторону больших частот до 10.85 ГГц, а значение коэффициента отражения при воздействии магнитного поля до 0.25–0.30 Тл уменьшается с 0.054 до 0.050. Далее, на частотах выше 11.5 ГГц коэффициент отражения вновь увеличивается под действием магнитного поля на пленку.

Как следует из рис. 3, 4, индукция магнитного поля оказывает влияние на СВЧ коэффициент отражения пленок Fe_2O_3 и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ — наблюдается частотное смещение максимумов и минимумов коэффициента отражения электромагнитной волны, а также изменение абсолютного значения коэффициента отражения в экстремумах частотной зависимости R . По всей видимости частотное смещение экстремумов коэффициента отражения в первую очередь определяется зависимостью величины действительной компоненты магнитной восприимчивости образца от индукции магнитного поля, а изменение абсолютного значения коэффициента отражения в экстремумах — зависимостью величины мнимой компоненты магнитной восприимчивости образца от магнитного поля.

Таким образом для рассматриваемых образцов магнитные поля оказывают влияние на коэффициент отражения СВЧ волн. Для пленок $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ воздействие магнитного поля на различных частотах позволяет как увеличивать максимальное значение коэффициента отражения, так и уменьшать его. Для пленок Fe_2O_3 воздействие магнитным полем, в основном, приводит к увеличению СВЧ коэффициента отражения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-72-20048).

- [1] I.V.Antonets, L.N.Kotov, Ye.A.Golubev, Mater. Chem. and Phys. **240**, 122097 (2020).
- [2] I.V.Antonets, E.A.Golubev, V.I.Shcheglov, S.Sun, Current Appl. Phys. **29**, 97 (2021).
- [3] I.V. Antonets, L.N. Kotov, E.A. Golubev, Yu.E. Kalinin, A.V. Sitnikov, Tech. Phys. **62(2)**, 261 (2017).

Перенос заряда в новых магнитных топологических изоляторах MnSb_2Te_4

Абдуллаев Н.А.^{1,2}, Алигулиева Х.В.³, Зверев В.Н.⁴, Алиев З.С.²,
Амирасланов И.Р.^{1,2}, Мамедов Н.Т.^{1,2}, Чулков Е.В.^{5,6}

¹ *Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан*
e-mail: abnadir@mail.ru

² *Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан*

³ *Сумгаитский Государственный Университет, Сумгаит, Азербайджан*

⁴ *Институт физики твёрдого тела РАН, Черногловка, Россия*

⁵ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

⁶ *Donostia International Physics Center (DIPC), Donostia-San Sebastian, Spain*

Несмотря на то, что топологические изоляторы обнаружены совсем недавно [1], с 2007 года опубликовано много работ и интерес к ним всё более возрастает. Практический интерес к топологическим изоляторам обусловлен в основном двумя причинами. Во-первых, из-за выполнения симметрии обращения времени для поверхностных состояний - запрещено рассеяние носителей заряда на дефектах и примесях. И поэтому носители заряда двигаются по поверхностным состояниям без потерь энергии. Во-вторых, существование на поверхностных состояниях спин-поляризованных токов, перспективных для использования в новой области электроники – спинтронике, в средствах переноса, записи и хранения информации.

В последнее время наблюдается новый всплеск интереса к топологическим изоляторам в связи с открытием магнитных топологических изоляторов [2,3]. В отличие от немагнитных аналогов, магнитные топологические изоляторы могут иметь щель в конусе Дирака для поверхностных состояний, что делает возможным наблюдение ряда уникальных физических явлений, таких как квантованный аномальный эффект Холла (QAH), магнитоэлектрический эффект, аксионная электродинамика, майорановские фермионы и др. [4-8].

В настоящей работе представлены данные электрических и гальваномагнитных исследований нового магнитного топологического соединения MnSb_2Te_4 кристаллизуются в слоистую структуру, в слое семь атомных плоскостей в последовательности Te-Sb-Te-Mn-Te-Sb-Te. Согласно данным рентгеновской дифракции (рис.1), монокристаллы MnSb_2Te_4 относятся к пространственной группе симметрии $R\bar{3}m$ с параметрами кристаллической решётки $a = 4.2613\text{Å}$ и $c = 41.062\text{Å}$. Рамановские исследования проводились в геометрии обратного рассеяния и представлены на рис.2. В качестве источника возбуждения использовалась вторая гармоника Nd:YAG лазера на длине волны 532 нм, а в качестве приёмника служила охлаждаемая до -100°C CCD камера (1024 на 128

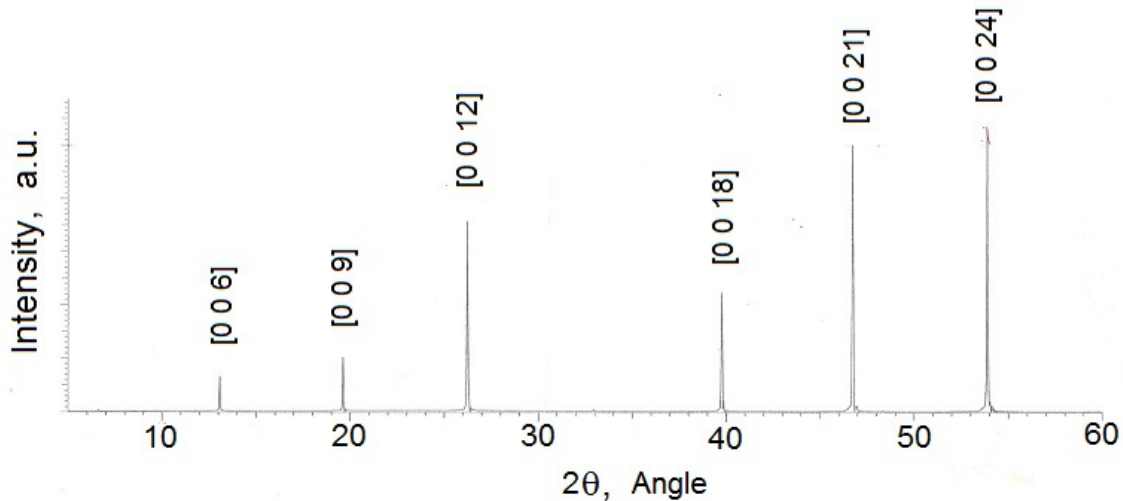


Рис.1. Рентгеновская дифракция в MnSb_2Te_4 .

пикселя), работающая в режиме счёта фотонов. При использовании дифракционной решётки 1800 штр./мм точность определения положения спектральных линий была не хуже 0.5 cm^{-1} .

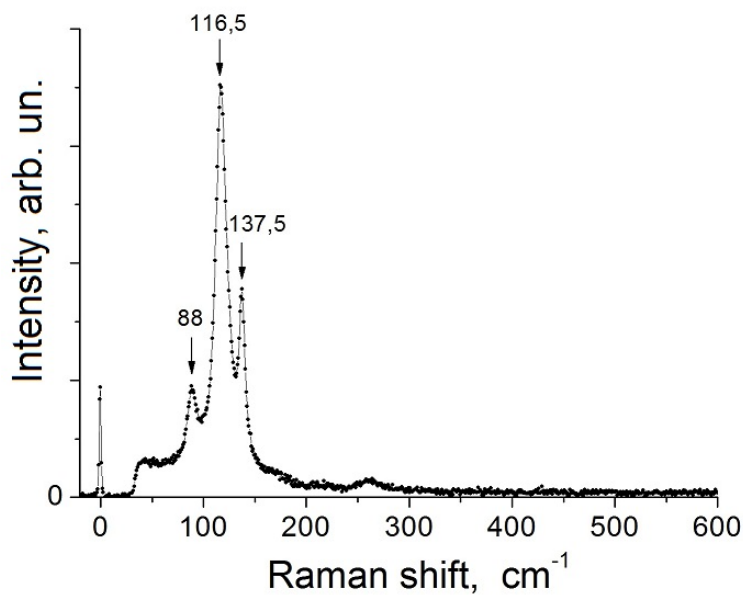


Рис.2. Рамановское рассеяние в MnSb_2Te_4 .

Электрические и гальваномагнитные (эффект Холла и магнитосопротивление) эффекты в слоистых кристаллах MnSb_2Te_4 были изучены стандартным четырёхзондовым методом по селективной методике на переменном токе частотой 20.5 Гц с использованием Lock-in Amplifier - SR830. Величина тока не превышала 1 мА. Исследования проводились в широкой области температур 1.4-300К. Сильные магнитные поля до 80 кЭ были получены с помощью сверхпроводящего соленоида. Образец при гальваномагнитных измерениях помещался в центр соленоида. На рис. 3а приведена температурная зависимость удельного сопротивления $\rho(T)$ в плоскости слоёв в кристаллах MnSb_2Te_4 . Как видно, в области температур

50-300К зависимость $\rho(T)$ имеет характерный “металлический” ход: с уменьшением температуры величина удельного сопротивления уменьшается. Такая температурная зависимость характерна и для классических узкозонных полупроводников Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 и др. [9-11]. Вышеизложенное обусловлено тем, что вследствие наличия большого числа антисайтных и межузловых дефектов образуется широкая примесная зона, перекрывающая запрещённую зону и потому наблюдается “металлический” характер проводимости. Далее, ниже температур $T=50\text{K}$, величина удельного сопротивления возрастает и зависимость $\rho(T)$ демонстрирует пик при критической температуре $T_c \sim 26\text{K}$ (рис. 3а). С целью выявления природы этого пика было изучено влияние внешнего магнитного поля на зависимость $\rho(T)$ (рис. 3б). Выявлено, при поле $B=3\text{T}$ пик практически исчезает, что означает пик при 26К имеет магнитную природу и вероятно имеет место магнитный фазовый переход.

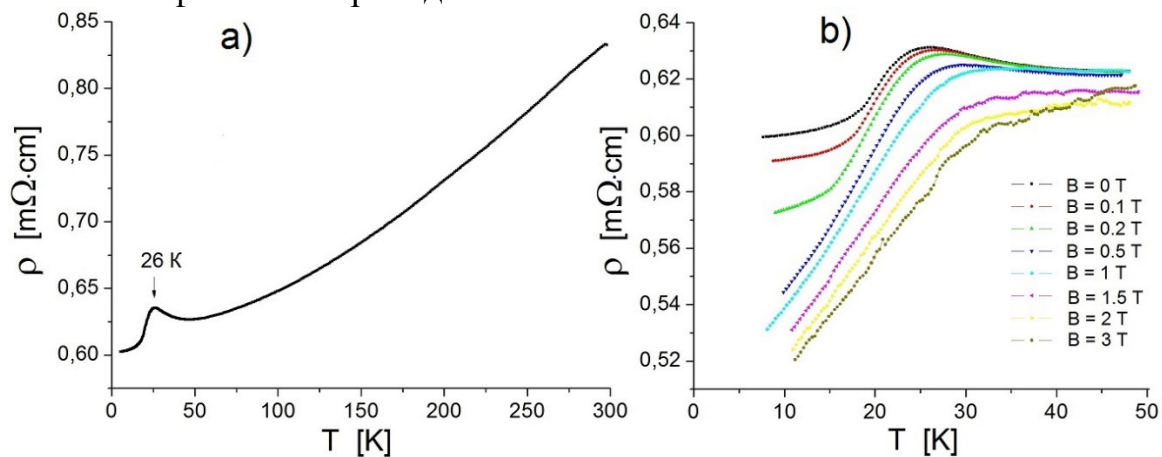


Рис.3. а) Температурная зависимость удельного сопротивления $\rho(T)$ в плоскости слоёв в кристаллах MnSb_2Te_4 ; б) влияние внешнего магнитного поля на $\rho(T)$.

С целью выяснения природы магнитного фазового перехода были проведены исследования эффекта Холла при различных температурах. Ток проходил в плоскости слоёв, магнитное поле было направлено перпендикулярно слоям. На рисунке 4а приведены данные измерений эффекта Холла при двух температурах ниже температуры магнитного фазового перехода $T=1.4\text{K}$ и 20K , и одной $T=40\text{K}$ выше T_c . Как видно из рис. 4а, при температурах ниже T_c имеет место гистерезис в зависимости холловского сопротивления от напряжённости магнитного поля и мы наблюдаем аномальный эффект Холла, характерный для ферромагнетиков. Таким образом, при температуре 26К мы наблюдаем магнитный фазовый переход парамагнетик-ферромагнетик. При более высоких температурах (в нашем случае $T=40\text{K}$) MnSb_2Te_4 переходит в состояние парамагнетика и мы наблюдаем нормальный эффект Холла с линейной зависимостью холловского сопротивления от магнитного поля.

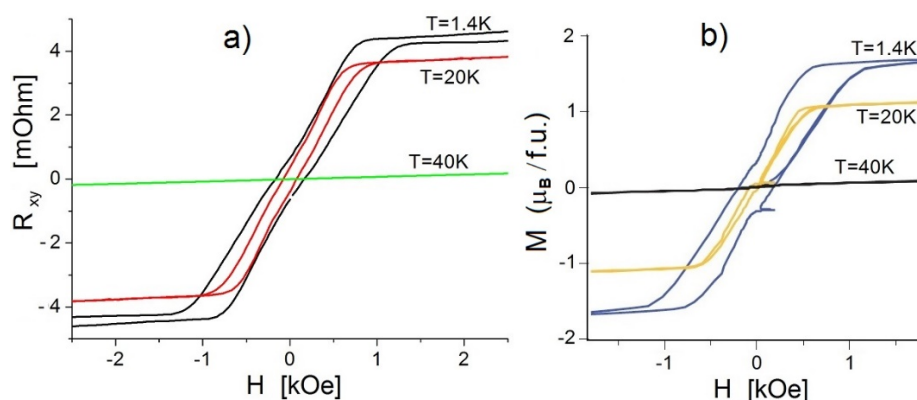


Рис.4. а) Зависимость холловского сопротивления $R_{xy}(T)$ от магнитного поля в кристаллах $MnSb_2Te_4$; б) зависимость намагниченности M от магнитного поля.

Для сравнения на рис. 4б приведена зависимость намагниченности M от магнитного поля. Как видим зависимости схожи и величины критических полей ± 1 кЭрст также совпадают.

- [1] J.E.Moore, Nature **464**, 194 (2010).
- [2] M.M.Otrokov, I.I.Klimovskikh, H.Bentmann, D.Estyunin, A.Zeugner, Z.S.Aliev, S.Gaß, A.Wolter, A.Koroleva, A.M.Shikin, N.A.Abdullayev, V.N.Zverev, N.T.Mamedov, E.V.Chulkov et al. Nature, **576**, 416 (2019).
- [3] I.I.Klimovskikh, M.M.Otrokov, D.Estyunin, S.V.Eremeev, S.O.Filnov, A.Koroleva, E.Shevchenko, V.Voroshnin, N.A.Abdullayev, V.N.Zverev, N.T.Mamedov, E.V.Chulkov et al. *npj Quantum Materials*, **5** 54 (2020).
- [4] Y.Tokura, K.Yasuda, A.Tsukazaki, Nature Reviews Physics **1**, 126 (2019). [5] C.-Z.Chang, J.Zhang, X.Feng, J.Shen, Z.Zhang, M.Guo, K.Li, Y.Ou, P.Wei, L.L.Wang, Z.-Q.Ji, Y.Feng, S.Ji, X.Chen, J.Jia, X.Dai, Z.Fang, S.-C.Zhang, K.He, Y.Wang, L.Lu, X.-C.Ma, Q.-K.Xue, Science **340**, 167 (2013).
- [6] Q.L.He, L.Pan, A.L.Stern, E.C.Burks, X.Che, G.Yin, J.Wang, B.Lian, Q.Zhou, E.S.Choi, K.Murata, X.Kou, Z.Chen, T.Nie, Q.Shao, Y.Fan, S.-C.Zhang, K.Liu, J.Xia, and K.L.Wang, Science **357**, 294 (2017).
- [7] A.M.Essin, J.E.Moore and D.Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **102**, 146805 (2009).
- [8] R.Li, J.Wang, X.-L.Qiand, S.-C.Zhang, Nature Phys. **6**, 284 (2010).
- [9] N.A.Abdullayev, S.Sh.Kakhramanov, T.G.Kerimova, K.M.Mustafaeva, and S.A.Nemov. Semiconductors, **43** (2), 145 (2009).
- [10] N.A.Abdullayev, N.M.Abdullayev, Kh.V.Aliguliyeva, T.G.Kerimova, G.S.Mehdiyev, and S.A.Nemov, Semiconductors, **45** (1), 37 (2011).
- [11] N.A.Abdullayev, K.M.Jafarli, Kh.V.Aliguliyeva, L.N.Aliyeva, S.Sh.Kahramanov, and S.A.Nemov. Semiconductors, **51** (7), 942 (2017).

Углеродные нанотрубки в эпоксидных смесях: синтез, свойства, применение

Юмалин Т.Т., Салихов Р.Б.

Уфимский Университет Науки и Технологий, Уфа, Россия

e-mail: salikhovrb@yandex.ru

В последние годы углеродные нанотрубки (УНТ) стали объектом увеличенного внимания в научных кругах, особенно в области электроники, где исследователи стремятся применить их в создании новых компонентов и устройств [1]. Одним из перспективных направлений является тонкопленочная электроника и различные полимеры [2-4]. Одной из перспективных областей применения УНТ является их интеграция в эпоксидные смеси для электронных устройств, с целью улучшения характеристик и производительности транзисторов.

Углеродные нанотрубки проявляют различные уровни электропроводности в зависимости от их хиральности (структурной особенности) и качества производственного процесса. Эти параметры могут быть изменены, чтобы получить нанотрубки с разнообразными проводимостями, варьирующимися от полупроводниковых до металлических.

Получение равномерного слоя углеродных нанотрубок на обширных поверхностях представляет собой сложную задачу, требующую специального подхода. Решение этой проблемы существенно расширяет возможности создания широкого спектра масштабируемых функциональных устройств, включая сканирующие зонды, сенсоры, эмиттеры поля и элементы нанoeлектроники. Для достижения контролируемой депозиции нанотрубок без дополнительной манипуляции или сборки требуется значительное техническое и научное усилие.

Один из подходов к формированию углеродного слоя на кремниевой подложке основан на синтезе углеродных нанотрубок на ее поверхности с использованием железного катализатора и химического осаждения. В данной работе использовалось стекло, покрытое индиево-оловянным оксидом (ITO), в качестве подложки. Для создания диэлектрического слоя был применен раствор AlO_x , который тщательно наносился на подложку с использованием

центрифугирования, а затем подвергался термическому воздействию в печи в течение 60 минут, обеспечивая слой толщиной 100 нм. Структура полученного транзистора приведена на рисунке 1.

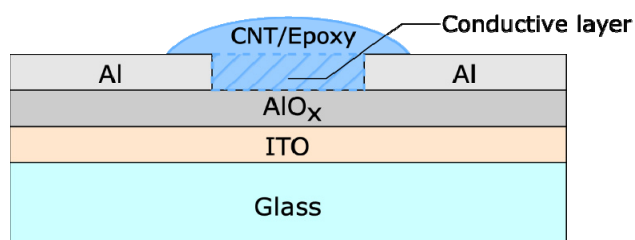


Рис.1 Структура тонкопленочного транзистора на основе эпоксидной смеси УНТ.

различных функциональных устройств в области электроники и нанотехнологий. Контактные площадки были получены путем термического напыления алюминия в вакуумных условиях.

Степень проводимости материала может быть регулирована путем изменения концентрации эпоксидной смеси. В данном исследовании концентрация углеродных нанотрубок (УНТ) в смеси составляла примерно 0,3% от общей массы. Оценка подвижности электронов (μ) была выполнена на основе вольтамперных характеристик и показала значение 28,87 см²/В·с при напряжении смещения U_{DS} равном 12 В. Таким образом, регулируемая степень проводимости и определенные значения подвижности электронов способствуют формированию материала с желаемыми электрическими характеристиками, что является важным для разработки электронных устройств и систем. Так же подобные устройства актуальны в решениях чувствительных к энергоэффективности, гибкости и мобильности [5-6].

Исследование выполнено в рамках государственного задания (приказ MN-8/1356 от 09/20/2021).

- [1] Salikhov, R. B., Zilberg, R. A., Mullagaliev, I. N., Salikhov, T. R., & Teres, Y. B. (2022). Nanocomposite thin film structures based on polyarylenephthalide with SWCNT and graphene oxide fillers. *Mendeleev Communications*, 32(4), 520-522.
- [2] Tuktarov, A. R., Salikhov, R. B., Khuzin, A. A., Safargalin, I. N., Mullagaliev, I. N., Venidiktova, O. V., Valova, T. M., Barachevsky, V. A., & Dzhemilev, U. M. (2019). Optically controlled field effect transistors based on photochromic spiropyran and fullerene C60 films. *Mendeleev Communications*, 29(2), 160-162.
- [3] Базунова М.В., Мустакимов Р.А., Салихов Р.Б., Муллагалиев И.Н. Пленочные материалы на основе полимерных смесей натриевой соли н-сукцинила хитозана с поли-н-винилпирролидоном. *Журнал прикладной химии*. 2022. Т. 95. № 6. С. 741-749.
- [4] Bazunova M.V., Salikhov R.B., Zaharov V.P. Accelerated climatic aging of polymer composite materials based on polypropylene and aluminum oxide. *Letters on Materials*. 2021. Т. 11. № 4 (44). С. 397-402.
- [5] Salikhov, T.R., Abdrakhmanov, V.K., & Yumalin, T.T. (2021). Application of Organic Sensors in Wireless Environmental Monitoring Systems. In *Proceedings of the Conference "2021 International Conference on Electrotechnical Complexes and Systems (ICOECS)"* (pp. 500-503)
- [6] Salikhov, R.B., Abdrakhmanov, V.K., & Yumalin, T.T. (2021). Experience of Using Bluetooth Low Energy to Develop a Sensor Data Exchange System Based on the NRF52832 Microcontroller. In *Proceedings of the Conference "2021 International Ural Conference on Electrical Power Engineering (UralCon)"* (pp. 229-233).

Магнитотранспортные свойства $(\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5})_3\text{As}_2$, подвергнутых гидростатическому давлению.

Сайпулаева Л.А.¹, Захвалинский В.С.², Алибеков А.Г.¹, Пирмагомедов З.Ш.¹, Кочура А. В.³, Гаджиалиев М.М.¹, Маренкин С.Ф.⁴, Риль А.И.⁴

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: l.saypulaeva@gmail.com

²Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия

³Юго-Западный государственный университет, г. Курск, Россия

⁴Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

Соединения $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$ представляют частный пример соединения арсенида кадмия (Cd_3As_2), в котором бесщелевые электронные состояния вблизи защищенных симметрией точек Дирака имеют линейную дисперсию и жестко связанные направления спина и импульса. По кристаллической структуре известны четыре полиморфные модификации арсенида кадмия α , α' , α'' и β . В случае традиционного метода кристаллизации Cd_3As_2 из расплава происходит $\beta \rightarrow \alpha''$ фазовый переход, который приводит к образованию структурных дефектов и увеличению плотности носителей заряда. Однако электронная плотность в Cd_3As_2 может быть уменьшена компенсацией легирования атомами, и кристаллы $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$ образуют непрерывный ряд $0 \leq x \leq 1$ твердых растворов [1,2]. За счет изменения концентрации Zn в системе $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$ реализуется переход от трехмерного Дираковского полуметала к тривиальному прямозонному полупроводнику при $x_c=0.38$, а в интервале значений $0.07 \leq x < 0.52$ происходит структурное превращение от тетрагональной объемноцентрированной фазы ($I4_1/amd$) к примитивной тетрагональной фазе ($P4_2/nmc$) и далее при $x > 0.52$ тетрагональная объемноцентрированная фаза восстанавливается

Данная работа является продолжением начатых нами [3] магнитотранспортных исследований $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$ при высоких давлениях.

Для создания высокого давления использовалась камера типа «Тороид» [4,5], создающая гидростатическое давление до 9 ГПа.

Дальнейшие исследования магнитотранспортных свойств в области давлений до 9 ГПа проведены на образце $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$ с ($x=0.50$).

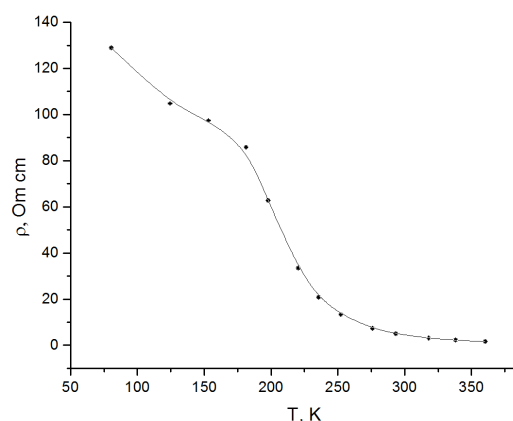


Рис.1 Температурная зависимость удельного сопротивления $\rho(T)$ $(\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5})_3\text{As}_2$.

На рис.1 показана температурная зависимость удельного электросопротивления $\rho(T)$ образца $(\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5})_3\text{As}_2$, которая демонстрирует изменение полупроводникового характера.

Что показывает повышение температуры приводит к увеличению количества свободных носителей заряда в полупроводнике.

При низких температурах коэффициент Холла R_H (Рис.2) принимает положительные значения. С ростом температуры коэффициент Холла убывает и при температуре около 200 К происходит смена типа носителей заряда- переход от материала р -типа к материалу n -типа – и становится отрицательным из-за большой подвижности электронов. График зависимости резко убывает до температуры 250 К, $R_H = -3150 \text{ см}^3/\text{Кл}$. Следовательно, основными носителями заряда от 77 К и до достижения 200 К являются дырки и полупроводник имеет р-тип проводимости. Затем происходит смена знака основных носителей заряда на противоположный, и основными носителями являются электроны, а полупроводник демонстрирует n-тип проводимости.

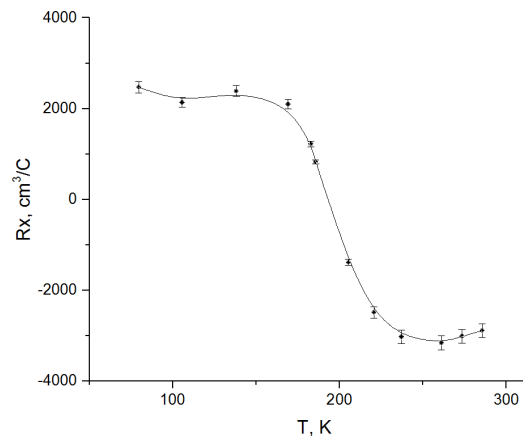


Рис.2 Температурная зависимость коэффициента Холла $R_H(T)$ $(\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5})_3\text{As}_2$.

В области $T < 200 \text{ К}$ холловская подвижность носителей заряда μ_H не зависит от температуры (Рис.3), и при $T > 200 \text{ К}$ происходит резкий рост μ_H . Слабо зависящий от температуры коэффициент Холла указывает на то, что при $T < 200 \text{ К}$ основными носителями тока являются дырки.

Исследования удельного сопротивления, коэффициента Холла $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$ в условиях гидростатического давления до 12 кбар при комнатной температуре проведены в работах [6-8].

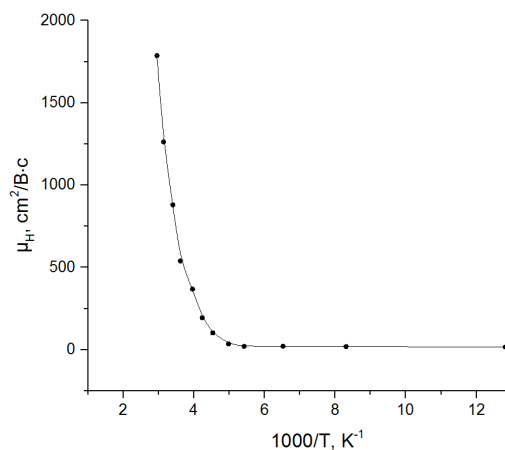


Рис.3 Температурная зависимость подвижности $(\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5})_3\text{As}_2$.

Барические зависимости удельного сопротивления $\rho(P)$, коэффициента Холла $R_H(P)$ и магнетосопротивления $\Delta R/R_0(P)$ $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$ с $x=0.50$ при фиксированных величинах магнитной индукции до 5 кЭ, при комнатной температуре, представлены на рисунках 4, 5, 6, соответственно. Величина поперечного МС рассчитывалась по формуле

$$\frac{\Delta R}{R_0} = \frac{R(B) - R(0)}{R(0)} \cdot 100 \quad (1)$$

где $R(B)$ и $R(0)$ - электросопротивление в поперечном магнитном поле с индукцией B и в отсутствии магнитного поля соответственно. Анализ данных, полученных в режимах подъема и сброса давления, позволил

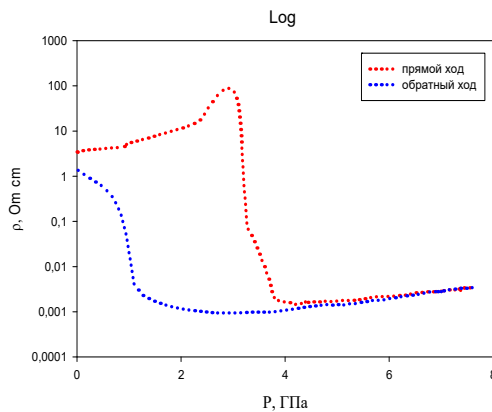


Рис.4 Барическая зависимость удельного сопротивления $\rho(P)$ $(Cd_{0.5}Zn_{0.5})_3As_2$.

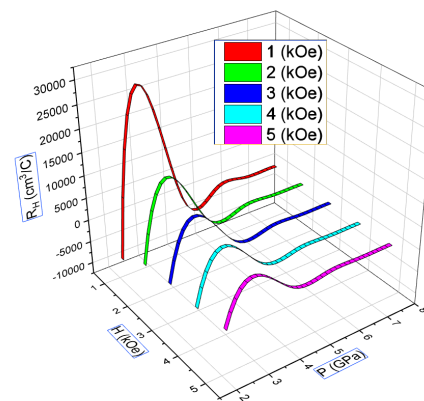


Рис.5 Барическая зависимость коэффициента Холла $R_H(P)$ $(Cd_{0.5}Zn_{0.5})_3As_2$.

качественно установить связь между поведением МС и наблюдаемым гистерезисом на зависимости $\rho(P)$. С ростом давления удельное сопротивление в $(Cd_{0.5}Zn_{0.5})_3As_2$ медленно растет и в диапазоне давлений $P \approx (2.8-3.5)$ ГПа наблюдается резкий скачок удельного сопротивления $\rho(P)$ (рис.4). После снятия давления образец не восстанавливается. Максимум удельного сопротивления, возможно, обусловлен фазовым переходом, которая выявляется при исследовании влияния всестороннего давления на электрические свойства $Cd_{3-x}Zn_xAs_2$.

При $P > 5$ ГПа удельное сопротивление $\rho(P)$ образца немонотонно увеличивается с ростом с давлением. Коэффициент Холла $R_H(P)$ в области давлений (2.5-3.5) ГПа достигает максимума в магнитном поле 1 кЭ (Рис.5).

Результаты исследования поперечного магнетосопротивления $\Delta\rho(P)/\rho_0$ представлены на рисунке 6. При давлении

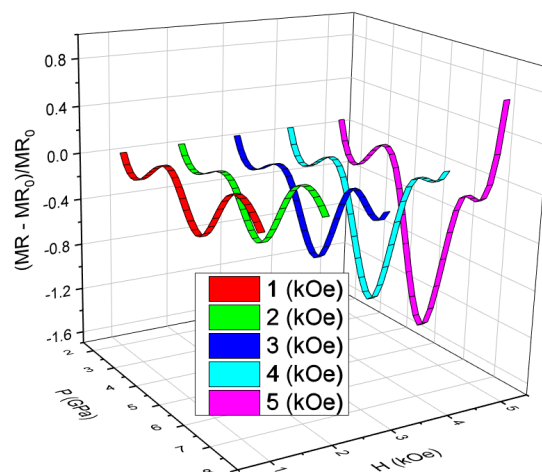


Рис.6 Зависимости магнетосопротивления композита $(Cd_{0.45}Zn_{0.50})_3As_2$ от давления при различных значениях индукции поперечного магнитного поля при увеличении давления. $(Cd_{0.5}Zn_{0.5})_3As_2$.

$P \geq 1.5$ ГПа магнитосопротивление принимает отрицательные значения. В поле 5 кЭ и при давлении $P=(4.0-4.7)$ ГПа отрицательное магнитосопротивление составляет максимальное значение (рис.6).

Изменения полевых зависимостей магнитосопротивления несимметричны в положительных и отрицательных магнитных полях. Cd_3As_2 известен, как один из материалов в котором четность магнитосопротивления может быть нарушена при определенных специфических условиях. Это может приводить как к легкой асимметрии, так и к киральности магнетосопротивления [9,10].

- [1] С.Ф.Маренкин, В.М.Трухан, Фосфиды, арсениды цинка и кадмия /. Минск, 223 (2010).
- [2] A.I.Belogorokhov, I.S.Zakharov, A.F.Knyazev, A.V.Kochura, *Inorganic Materials* **36**, 653 (2000).
- [3] Л.А.Сайпулаева, В.С.Захвалинский, А.Г.Алибеков, З.Ш.Пирмагомедов, М.М.Гаджиалиев, С.Ф.Маренкин, А.И.Риль, Тезисы XII Международной конференции «Фазовые превращения прочность кристаллов» памяти академика Г.В. Курдюмова. ФППК-2022, г.Черноголовка, 48 (2022). Поверхность
- [4] A.Yu.Mollaev, L.A.Saypulaeva, R.K.Arslanov, S.F.Gabibov, S.F.Marenkin, *High Press. Res.* **22**, 181 (2002).
- [5] L.G. Khvostantsev, V.N.Slesarev and V.V.Brazhkin *High Pressure Res.* **24**, 371 (2004).
- [6] J. Cisowski and W. Zdanowicz, *Solid Solutions, Phys. Stat. Sol. (a)* **19**, 741 (1973).
- [7] J. Cisowski and W. Zdanowicz, *Solid Solutions. Phys. stat. sol. (a)* **41**, K59 (1977).
- [8] А.В.Лашкул, Я.Цисовски, Э.К.Арушанов, А.Ф.Князев, *ФТТ* **19**, 1406 (1989).
- [9] V.S.Zakhvalinskii, T.B.Nikulicheva, A.V.Kochura, E.Lahderanta, M.Shakhov, A.S.Kubankin, M.Sukhov, M. N.Yaprintsev, and A.A.Morocho, *AIP Advances* **11**, 035028 (2021).
- [10] O.Ivanov, V.Zakhvalinskii, T.Nikulicheva, M.Yaprintsev, and S.Ivanichikhin, *Phys. Status Solidi Rapid Research Letters.* **12**, 1800386 (2018).

Influence of morphology on the sensory properties of thin polymer composite films

Safargalin I.N., Salikhov R.B.

Ufa University of Science and Technology, Ufa

e-mail: idrissafargalin@mail.com

The production of thin films is a modern technology aimed at improving the structural, dispersed, optical, and mechanical properties of bulk materials [1–4]. The direction finds application in integrated circuits, semiconductor elements, transistors, light emitting diodes, light crystal displays and photoconductors, solar sensors, gas sensors and microelectromechanical filters.

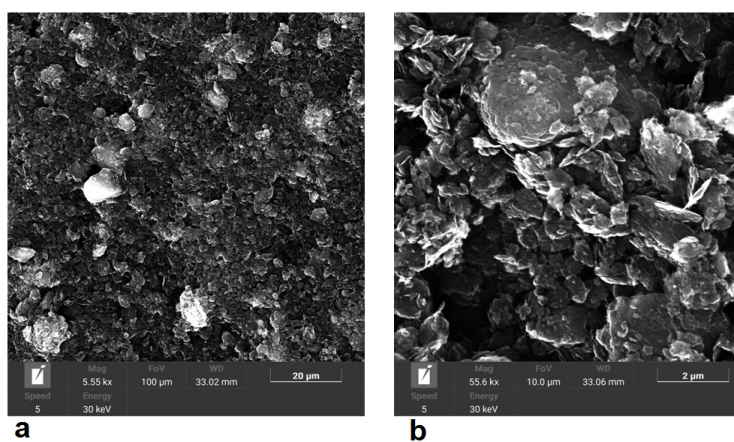
The products of resistive thin-film structures were prepared on the basis of the polymer with CNTs and graphene oxide, the dependence of the current on the sample was measured if it was necessary to search for metal.

Using a scanning electron microscope (SEM) TESCAN MIRA LMS and TESCAN Essence software,

the influence of the surface morphology of thin films on their sensory properties was studied. The surface morphology is developed, inhomogeneous, with small dips in depth, which facilitates the access of a larger number of gas molecules. Average roughness $S_a = 127.3$ and rms roughness $S_q = 172.5$ ($10 \times 10 \mu\text{m}$).

This publication is based on support by the State assignment for the implementation of scientific research by laboratories (Order MN-8/1356 of 09/20/2021).

- [1] R. B. Salikhov, I. N. Mullagaliev, T. R. Salikhov. In *Functional materials*. 309-309 (2021)
- [2] Salikhov R.B., Bazunova M.V., Salikhov T.R., Bazunova A.A., Zakharov V.P. (2020). *Letters on Materials*. V. **39(3)**, 288-293 (2020)
- [3] A. G. Mustafin, L. R. Latypova, A. N. Andriianova, S. M. Salikhov, A. F. Sattarova, I. N. Mullagaliev, I. B. Abdrakhmanov, *Macromolecules*. V. **53(18)**, 8050-8059 (2020)
- [4] A. G. Mustafin, L. R. Latypova, A. N. Andriianova, I. N. Mullagaliev, S. M. Salikhov, R. B. Salikhov, G. S. Usmanova, *RSC advances*. V. **11(34)**, 21006-21016 (2021)



*Fig.1. SEM images of the surface of thin-film samples.
Sample scanning area size: a – 100 μm , b – 10 μm .*

Секция А3

Материалы с памятью
формы, магнитокалорические
материалы, мультиферроики

Аномальный эффект Холла в магнитно-неоднородных структурах: сплавы Гейслера и нанокompозиты

Грановский А.Б.^{1,2}, Блинов М. И.¹, Прудников В.Н.¹, Дубенко И.С.³,
Николаев С.Н.⁴, Рыльков В.В.^{2,4}

¹ *Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Институт Теоретической и Прикладной Электродинамики РАН, Москва, Россия*
e-mail: granov@magn.ru

³ *Университет Южного Иллинойса, Карбондейл, США*
e-mail: igor_doubenko@yahoo.com

⁴ *Научный центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия*
e-mail: vvrylkov@msil.ru

В докладе анализируются особенности концентрационных и температурных зависимостей аномального эффекта Холла (АЭХ) в магнитно-неоднородных системах. АЭХ относится к числу наиболее эффективных зондов-индикаторов фазовых переходов и изменений электронной и магнитной структуры. Изучение АЭХ, центрального в группе спонтанных гальваномагнитных явлений и яркого представителя спин-зависимых транспортных явлений, имеет и самостоятельное значение, поскольку продолжаются дискуссии о роли различных механизмов в формировании этого эффекта, особенно у сплавов Гейслера [1-4]. Открытие топологического и антиферромагнитного АЭХ, туннельного АЭХ [5], а также АЭХ в отсутствие спонтанной намагниченности определяет новый этап в исследовании этого эффекта.

Принято считать, что сопротивление АЭХ ферромагнитных материалов линейно зависит от намагниченности, а коэффициент АЭХ R_s подчиняется скейлинговому соотношению $R_s \sim \rho^n$, где ρ - сопротивление, а n – степенной показатель, изменяющийся в однородных сплавах от 0.4 до 2 в зависимости от механизма АЭХ и величины сопротивления. В докладе на основе теории эффективного поля и анализа экспериментальных данных относительно АЭХ в испытывающих мартенситный переход магнитных сплавах Гейслера [1-4] и магнитных нанокompозитах “ферромагнитный металл-диэлектрик” [5,6] показано, что в магнитно-неоднородных системах нет универсального поведения АЭХ.

В частности, поведение коэффициента АЭХ в неоднородной мартенситной фазе сплавов Гейслера и в окрестности мартенситного перехода не является универсальным и сильно зависит от состава и микроструктуры сплавов. Например, в сплаве $Ni_{45}Cr_5Mn_{37}In_{13}$ обнаружено, что в мартенсите, содержащем области замороженной аустенитной фазы, коэффициент АЭХ R_s увеличивается с температурой при одновременном уменьшении удельного сопротивления ρ , что противоречит скейлингу $R_s \sim \rho^n$ с любыми положительными значениями n . Тогда как в однородной аустенитной фазе этого же сплава АЭХ описывается

стандартной линейно-квадратичной функцией сопротивления $R_s = a\rho + b\rho^2$. В том случае если магнитные свойства аустенитной и мартенситной фазы близки и мартенситный переход носит латентный характер, как в сплаве Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}, температурная зависимость АЭХ также описывается этим соотношением [4].

Обнаруженная нелинейная полевая зависимость сопротивления АЭХ в сплаве Ni_{47.3}Mn_{0.6}Ga_{22.1} [3] интерпретируется перераспределением d-подобных состояний с противоположным индексом спина, влиянием магнитного поля на электронную структуру и антиферромагнитными корреляциями, но не как следствие топологического АЭХ скирмионов [7].

В сплаве Ni₄₉BiMn₃₅In₁₅ при $T < 100$ К наблюдается сильно немонотонная зависимость сопротивления АЭХ от температуры, причина которой возможно связана с метастабильным состоянием.

Другим примером является АЭХ в туннельном режиме в нанокompозитах состава близкого к порогу перколяции, когда n принимает разные значения (от 0.11 до 0.6), причем отличающиеся для температурных и концентрационных зависимостей [5, 6]. В докладе и обсуждаются возможные причины такого поведения и приводятся результаты исследования туннельного АЭХ в ряде нанокompозитов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 22-19-00171).

- [1] M. Blinov, A. Aryal, S. Pandey et al., Phys. Rev. B **101**, 094423 (2020).
- [2] S. Pandey, M.I. Blinov, A. Aryal et al., J. Magn. Magn. Mater. **481**, 25 (2019).
- [3] M. I. Blinov, V. Chernenko, V. N. Prudnikov et al., Phys. Rev. B **102**, 064413 (2020).
- [4] M. I. Blinov, V. A. Chernenko, V. N. Prudnikov et al., JETP **159**, 546 (2021).
- [5] V.V. Rylkov, S.N. Nikolaev, K.Yu. Chernoglazov et. al. Phys. Rev. B **95**, 144202 (2017).
- [6] В.В. Рыльков, А.В. Емельянов, С.Н. Николаев и др., ЖЭТФ, 158, 164 (2020)
- [7] W. Zhang, B. Balasubramanian, A. Ullah et al., Appl. Phys. Lett. **115**, 172404 (2019).

Магнитное упорядочение и киральность в мультиферроике DyMnO_3

Матвеева А.Н., Зобкало И.А.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
e-mail: matveeva_an@pnpi.nrcki.ru*

Соединения из семейства орторомбических манганитов RMnO_3 ($R = \text{Dy}$) считаются типичными представителями мультиферроиков II типа. Описание микроскопических механизмов, ответственных за магнитоэлектричество в мультиферроидных материалах в целом и в серии RMnO_3 в частности является важным шагом к созданию функциональных материалов с предсказуемыми свойствами. Несмотря на большое количество работ на эту тему, точный микроскопический механизм возникновения спонтанной электрической поляризации в системах DyMnO_3 все еще находится в стадии обсуждения.

Структурные и магнитные свойства монокристаллов DyMnO_3 были исследованы методом дифракции нейтронов с целью изучения особенностей 3d-4f взаимодействий в этом соединении. Точный магнитный порядок и его детальная температурная эволюция были определены с помощью монокристаллической дифракции нейтронов. Для измерений мы использовали качественный монокристалл DyMnO_3 . Он имеет форму куба с приблизительными размерами $3 * 3 * 3 \text{ мм}^3$.

Исследования дифракции нейтронов проводились на дифрактометрах HEIDI [1] в Центре MLZ в Гархинге. Этот четырехкружный дифрактометр предназначенный для детального изучения структурных и магнитных свойств монокристаллов с использованием горячих нейтронов.

Для определения магнитной структуры методом неполяризованной дифракции были собраны наборы данных от магнитных сателлитов. Был проведен представленный анализ и анализ методом магнитных супергрупп. Для уточнения кристаллической и магнитных структур был использован FullProf suite. В качестве дополнительной информации использовались результаты наших измерений методом сферической нейтронной поляриметрии (SNP). Измерения в полуполяризованном режиме с внешним электрическим полем проводились для исследования киральных свойств. Измерения с поляризованными нейтронами проводились на дифрактометре POLI в Центре MLZ в Гархинге.

Магнитная структура, описывающая магнитные моменты на марганцевой подсистеме ниже $= 19\text{K}$ - эллиптическая циклоида, с понижением температуры эллиптичность магнитной структуры Mn значительно уменьшается, создавая почти круглую циклоиду. Точные значения упорядоченных магнитных моментов в положениях Dy и Mn соответственно были получены в DyMnO_3 в результате уточнения магнитных при температурах выше и ниже упорядочения Dy. Интересно, что магнитная подсистема Dy имеет два вектора распространения одновременно при низкой температуре 2.5K : $k_{\text{Dy}1} = (0\ 0.5\ 0)$ и $k_{\text{Dy}2} = (0\ k_y\ 0)$.

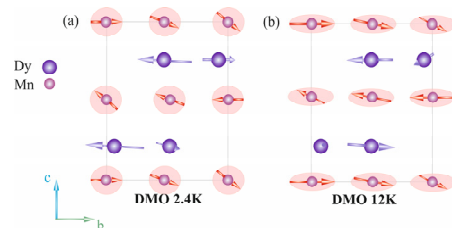


Рис.1 Несоразмерная магнитная структура (a) DyMnO_3 при 2.4K , (b) DyMnO_3 при 12K . [2]

Температурная эволюция магнитной структуры демонстрирует специфическое гистерезисное поведение.

Результаты показывают сложное взаимодействие между магнитными подрешетками переходных металлов и редкоземельных элементов, приводящее к так называемым “Mn-контролируемым” и “Dy-контролируемым” магнитным состояниям. Сильное и сложное взаимодействие $3d-4f$ приводит к необычной очень медленной релаксации магнитной структуры. Наши наблюдения являются прямым доказательством существования активного взаимодействия между двумя магнитными подрешетками, которое следует учитывать для описания механизма мультиферроичности в DyMnO_3 .

- [1] M.Meven, A.Sazonov, HEiDi: Single crystal diffractometer at hot source, Journal of large-scale research facilities, 1, A7 (2015). DOI: 10.17815/jlsrf-1-20
- [2] A.N.Matveeva, I.A.Zobkalo, M.Meven, A.Sazonov, A.L.Freidman, S.V.Semenov, M.I.Kolkov, K.Yu.Terentjev, N.S.Pavlovskiy, K.A.Shaikhutdinov, V.Hutunu, Journal of Magnetism and Magnetic Materials vol. 569 pp. 170415 (January 2023).

Фазовые превращения и эффект памяти формы в аморфно-кристаллическом сплаве TiNiCu после омоложения

Шеляков А.В.¹, Ситников Н.Н.^{1,2}, Хачатрян Д.А.¹,

Севрюков О.Н.¹, Залетова И.А.²

¹ НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

e-mail: alex-shel@mail.ru

² АО ГНЦ «Центр Келдыша», Москва, Россия

e-mail: sitnikov_nikolay@mail.ru

В последние годы функциональные материалы, то есть материалы, способные изменять свои свойства, в частности, размеры и формы, под действием внешних полей (тепловых, магнитных, электрических) находят все большее применение при создании систем нового уровня в информатике, энергетике, медицине, на транспорте. Ярким примером так называемого «умного» функционального материала являются сплавы, обладающие эффектом памяти формы (ЭПФ) [1]. Последние достижения в области микроэлектромеханических систем (МЭМС) делают весьма актуальным спрос на простые, точные и надежные инструменты для манипулирования на микроуровне. Сплавы с ЭПФ, обладающие целым рядом уникальных характеристик, таких как высокое отношение мощности к весу, большая возвращаемая деформация, большое усилие срабатывания, устойчивость к коррозии, низкая стоимость, биосовместимость, чистое и бесшумное срабатывание, имеют существенные преимущества по сравнению с другими методами активации, что недавно позволило продемонстрировать их весьма успешное использование в МЭМС [2].

Для создания миниатюрных и быстродействующих микромеханических устройств на основе сплавов с ЭПФ требуются тонкие материалы с узким температурным гистерезисом. Перспективным вариантом материала, удовлетворяющего этим требованиям, являются сплавы квазибинарной интерметаллической системы TiNi-TiCu с содержанием меди более 10 ат.%, полученные с использованием технологии быстрой закалки из жидкого состояния в виде тонких лент толщиной 30-50 мкм [3].

С учетом того, что для микромеханических применений в подавляющем большинстве случаев требуются устройства циклического действия, наиболее предпочтительно использовать так называемый обратимый ЭПФ в сплавах, когда реализуется обратимое изменение формы элемента с ЭПФ в цикле нагрев-охлаждение. В связи с этим в последнее время особое внимание привлекают композитные материалы, содержащие слой материала с ЭПФ и упругий слой. Недавно нами был разработан и всесторонне исследован аморфно-кристаллический ленточный композит из

быстрозакаленного сплава TiNiCu, который проявляет обратимый ЭПФ [4]. На основе такого структурного композита разработаны и изготовлены различные микромеханические устройства (микропинцеты) для захвата и манипулирования микро- и нанообъектами [5]. Расширение функциональных возможностей, повышение характеристик и дальнейшая миниатюризация разработанных микропинцетов могут быть достигнуты в первую очередь за счет улучшения физико-механических свойств аморфно-кристаллических сплавов с обратимым ЭПФ. Одним из способов для достижения этой цели может служить обработка сплавов с помощью процедуры омоложения, которое представляет собой структурное возбуждение твердых тел за счет охлаждения до низких температур, сопровождающееся увеличением энтальпии и свободного объема и, следовательно, является обратным старению [6]. В работе [7] показано, что криогенное термоциклирование, заключающееся в кратковременном нагреве и последующем охлаждении до низких температур, позволяет получать более «расслабленные» состояния (с меньшим уровнем внутренних напряжений - релаксация) с более высокой энергией. В настоящей работе проведено изучение влияния процесса омоложения на структуру и функциональные свойства, в первую очередь на критические температуры мартенситного превращения и величину обратимого ЭПФ, быстрозакаленного аморфно-кристаллического сплава TiNiCu.

В качестве объекта исследования был выбран сплав квазибинарной системы TiNi-TiCu с содержанием Cu 25 ат.%, полученный в виде тонких лент толщиной около 40 мкм с использованием технологии быстрой закалки из жидкого состояния при скоростях охлаждения расплава, обеспечивающих формирование кристаллического слоя на свободной (неконтактной) стороне ленты.

Процедуру омоложения проводили двумя способами. В первом из них (RJ1) использовалось криогенное термоциклирование по специально разработанной методике: полученные быстрозакаленные ленты были подвергнуты воздействию 10 изотермических циклов, каждый из которых заключался в 120 секундном удержании образца при температуре 77 К в жидком азоте и 60 секундной выдержке при температуре 373 К в кипящей воде. Во втором способе (RJ2) ленты выдерживались 30 минут в жидком азоте, а затем 1 мин в кипящей воде однократно.

Микроструктура поперечного сечения образцов изучалась с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) FEI Quanta 600 FEG. Как видно на Рис.1, со свободной стороны ленты формируется сплошной тонкий слой кристаллической фазы на аморфной основной части ленты, образующейся с контактной по отношению к закалочному диску стороны ленты. При этом формируется аморфно-кристаллический композит с четкой границей, разделяющей аморфный и кристаллический слои. За счет варьирования скорости охлаждения расплава в диапазоне 10^5 - 10^6 К/с, была

получена серия образцов слоистых аморфно-кристаллических лент из сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ (ат.%) с различными толщинами кристаллического слоя d от 6 до 13 мкм. Проведенные СЭМ-исследования образцов не выявили заметных изменений в их микроструктуре после криотермоциклирования. В то же время обнаружено незначительное увеличение толщины кристаллического слоя, а также некоторая трансформация границы раздела между аморфным и кристаллическим слоями, которая, однако, требует более детального изучения, например, в просвечивающем электронном микроскопе.

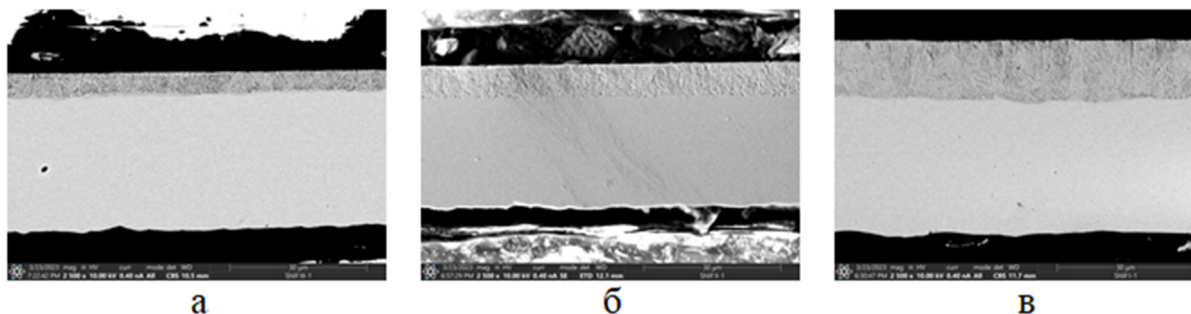


Рис. 1. СЭМ-изображения поперечного сечения быстрозакаленных аморфно-кристаллических лент, полученных при разных скоростях охлаждения расплава: а - $8 \cdot 10^5$ K/c, б - $6 \cdot 10^5$ K/c, в - $4 \cdot 10^5$ K/c.

Для определения температурных интервалов и характера мартенситного превращения (МП) в образцах сплава использовался метод дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Полученные данные показали, что для разных образцов наблюдались разные изменения в параметрах МП. Для образцов с $d = 10$ мкм обработка RJ1 привела к понижению критических температур МП, в то время как после обработки RJ2 они несколько возросли, при этом наблюдалось увеличение энтальпии обратного МП. В образцах с $d = 13$ мкм при обеих обработках температуры фазового перехода увеличились.

Во всех полученных образцах слоистых аморфно-кристаллических лент наблюдается ЭОПФ с деформацией изгибом без какой-либо дополнительной термомеханической обработки, который заключается в следующем: в исходном состоянии при комнатной температуре лента имеет прямолинейную форму; при нагреве выше температуры начала обратного МП она начинает изгибаться и при температуре выше конца обратного МП принимает форму, близкую к кольцу. Охлаждение ленты до температуры ниже конца прямого МП приводит к её возврату в исходное прямолинейное состояние. В дальнейшем данный эффект повторяется в цикле нагрев-охлаждение. Формоизменение образцов при реализации обратимого ЭПФ контролировалось с помощью видеофиксации. Из полученных изображений определяли радиус изгиба ленты и, соответственно, ее деформацию при разных температурах. Установлено, что криогенная термообработка может приводить к заметному (до 10%) увеличению обратимой деформации (величины обратимого ЭПФ), а также к существенному сужению

температурного гистерезиса формоизменения, Это позволяет надеяться на улучшение функциональных свойств микроустройств на основе быстрозакаленных аморфно-кристаллических лент.

Работа выполнена за счет гранта РФФИ (проект № 23-29-00779).

- [1] J.M. Jani, M. Leary, A. Subic, M.A. Gibson, *Mater. Des.* **56**, 1078 (2013).
- [2] I. Stachiv, E. Alarcon, M. Lamac, *Metals* **11**, 415 (2021).
- [3] A.V.Shelyakov, N.N.Sitnikov, A.P. Menushenkov, et al. *Thin Solid Films.* **519**, 5314 (2011).
- [4] A.V. Shelyakov, N.N. Sitnikov, A.P. Menushenkov, et al. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics* **79(9)**, 1134 (2015).
- [5] A. Shelyakov, N. Sitnikov, K. Borodako, et al. *J Micro-Bio Robot* **16**, 43 (2020).
- [6] A. Concustell et al. *Phil. Mag. Lett.* **89**, 831 (2009).
- [7] S.V. Ketov, Y.H. Sun, S. Nachum, et al., *Nature* **524**, 200 (2015).

Магнитокалорический и магнитострикционный эффекты в области магнитоструктурных фазовых переходов в замещенных составах типа R_5T_4 ($T = Si$ и Ge)

Курганская А.А., Овченкова Ю.А., Морозкин А.В., Богданов А.Е.,
Терёшина И.С.

Московский Государственный Университет имени МюВю Ломоносова, Москва, Россия
e-mail: kurganskaia.aa17@physics.msu.ru

Соединения с общей формулой R_5T_4 (R – редкоземельный металл, $T = Si$ и Ge) были открыты несколько лет назад и сразу же вызвали огромный научный интерес, в связи с гигантским магнитокалорическим эффектом, который демонстрировало соединение $Gd_5Si_2Ge_2$ вблизи комнатной температуры в области магнитоструктурного фазового перехода I рода. Как следствие перехода I рода, при исследовании МКЭ наблюдался значительный магнитный гистерезис. При понижении температуры от комнатной соединение $Gd_5Si_2Ge_2$ испытывает также структурный фазовый переход из моноклинной в орторомбическую фазу. Известно [1], что род перехода, величину МКЭ и температуру, при которой наблюдается максимальный эффект, а также температуру структурного фазового перехода можно изменить, используя атомы замещения. Цель данной работы была исследовать магнитокалорический эффект в замещенных составах $(Gd,Tb)_5Si_2Ge_2$. Кроме того, наряду с магнитокалорическим эффектом планировалось исследовать магнитострикционный эффект, который крайне чувствителен к изменению кристаллической структуры.

Синтез образцов производился плавкой в электродуговой печи. Образцы переплавлялись 3 раза (с контролем массы сплава) с последующим изотермическим отжигом. Рентгенофазовый анализ показал, что полученные образцы были практически однофазные. Параметры решётки хорошо согласуются с известными литературными данными [2]. Температура Кюри определялась с помощью термомагнитного анализа. Магнитокалорический эффект в данной работе был измерен прямым методом, магнитострикционный эффект – тензометрическим методом. Все измерения проводились на одних и тех же образцах, вырезанных в виде пластин размером $4*3*2$ мм в магнитных полях до 10 кЭ в интервале температур 100 – 320 К.

Температура Кюри и температура структурного фазового перехода в замещённых составах $(Gd,Tb)_5Si_2Ge_2$ уменьшается с увеличением концентрации тербия. Известно, что полное замещение атомов гадолиния атомами тербия не приводит к смене рода магнитоструктурного фазового перехода в соединении $Tb_5Si_2Ge_2$ [2].

В работе проанализированы температурные и полевые зависимости продольной, поперечной, объёмной и анизотропной магнитострикции.

Установлено, что частичное замещение атомов гадолиния атомами тербия (при невысоких концентрациях последнего) меняет знак объёмной магнитострикции с положительного (у соединения $Gd_5Si_2Ge_2$ [3]) на отрицательный. Температурные зависимости объёмной магнитострикции демонстрируют магнитный гистерезис, что дополнительно подтверждает 1 род структурного фазового перехода из моноклинной в орторомбическую фазы.

Температурные зависимости магнитокалорического эффекта соединений $(Gd,Tb)_5Si_2Ge_2$ также демонстрируют магнитный гистерезис. Большая величина магнитокалорического эффекта наблюдается только при понижении температуры, в то время как при увеличении температуры величина магнитокалорического эффекта может уменьшаться в 5-6 раз.

Все вышеописанные эффекты связаны с тем, что температура структурного фазового перехода находится в соединениях $(Gd,Tb)_5Si_2Ge_2$ с невысоким содержанием тербия между температурами магнитного фазового перехода орторомбической и моноклинной фаз. Именно поэтому при достижении температуры структурного фазового перехода в исследованных соединениях индицируется магнитный фазовый переход 1-го рода.

Материалы с гигантским магнитокалорическим эффектом, который имеет место при температурах ниже комнатной, а именно в интервале 200-290 К могут быть использованы в специальных охлаждающих устройствах и установках, поддерживающих строго определённую температуру, необходимую, к примеру, для хранения и транспортировки биоматериалов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-29-00773 <https://rscf.ru/project/22-29-00773/>.

- [1] V. K. Pecharsky and K. A. Gschneidner, *Pure and Applied Chemistry*, **79**, 8, 1383-1402. (2007) <https://doi.org/10.1351/pac200779081383>
- [2] A. Pereira, E. Kampert, J. Moreira, U. Zeitler, J. Belo, C. Magén, P. Algarabel, L. Morellón, M. Ibarra, J. Gonçalves, J. Amaral, V. Amaral, J. Sousa, J. Araujo. *Applied Physics Letters*. **99**. 132510-132510 (2011). DOI: 10.1063/1.3640213.
- [3] Nikitin, S.A., et al. *J. Appl. Phys.* **124**, 083902 (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5036723>

Исследование влияния термомеханической электроимпульсной обработки на быстрозакалённые слоистые аморфно-кристаллические ленты из сплава TiNiCu

Ситников Н.Н.¹, Залетова И.А.¹, Шеляков А.В.², Грешнякова С.В.¹

¹АО ГНЦ «Центр Келдыша», Москва, Россия

²НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

e-mail: sitnikov_nikolay@mail.ru

В работе исследовались аморфно-кристаллические ленты из сплава Ti₅₀Ni₂₅Cu₂₅ (ат.%), полученные методом сверхбыстрой закалки расплава на вращающемся диске (метод планарного литья), толщиной около 40 мкм. В зависимости от параметров закалки возможно получение ленты, в которой с неконтактной (свободной) стороны формируется сплошной тонкий слой кристаллической фазы на аморфной основной части ленты, образующейся с контактной по отношению к закалочному диску стороны ленты (рис. 1а). При этом формируется аморфно-кристаллический композит с чёткой границей, разделяющей аморфный и кристаллический слои. Применяя метод планарного литья с варьированием скорости охлаждения расплава в диапазоне 10⁵-10⁶ К/с, возможно получение образцов слоистых аморфно-кристаллических лент из сплава Ti₅₀Ni₂₅Cu₂₅ с различными толщинами кристаллического слоя от 2 до 10 мкм. В полученных образцах быстрозакалённых слоистых аморфно-кристаллических лент наблюдается эффект обратимый памяти формы (ЭОПФ) с деформацией изгибом без какой-либо дополнительной термомеханической обработки. Полученные образцы были всесторонне изучены методами металлографии, растровой электронной микроскопии (РЭМ), рентгеноструктурного анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

Исследование влияния изотермической обработки (ИТО) аморфно-кристаллических лент в муфельной печи проводилось при температуре 500°С с выдержкой 300 секунд в «свободном» состоянии и в оправке для придания прямолинейной. После кристаллизации в свободном состоянии образцы характеризуются формой близкой к кольцу. При термоциклировании кристаллизованных образцов в интервале МП (в диапазоне 25-100°С) в них не наблюдается ЭОПФ, а присутствует только однократный эффект памяти формы, т.е. образцы восстанавливают форму кольца при нагреве после их предварительного деформирования и сохраняют эту форму после охлаждения. Образцы, кристаллизованные в прямолинейной оправке, после остывания и извлечения из оправки характеризуются прямолинейной формой. При нагреве до температуры 100°С образцы изгибаются, но незначительно (намного меньше изгиба при реализации ЭОПФ в исходном быстрозакалённом состоянии), а при остывании до комнатной температуры вновь принимают

прямолинейную форму. Таким образом, наблюдается ослабленный (остаточный) ЭОПФ.

Микроструктура кристаллизованных образцов, наблюдаемая с помощью РЭМ в поперечном сечении, имеет неоднородное распределение кристаллов по толщине ленты (рис. 1б). С неконтактной поверхности ленты наблюдается сохранившаяся столбчатая структура кристаллов, сформировавшаяся при закалке расплава. Высота столбчатых кристаллов увеличилась на несколько микрон по сравнению с исходной толщиной кристаллического слоя. Во внутренней части ленты сформировалась однородная субмикронная кристаллическая структура. Отмечено, что после такой термообработки в поперечном сечении структурного слоистого композита сохраняется граница разделения структуры, сформированной из аморфной части, и рекристаллизованного поверхностного кристаллического слоя.

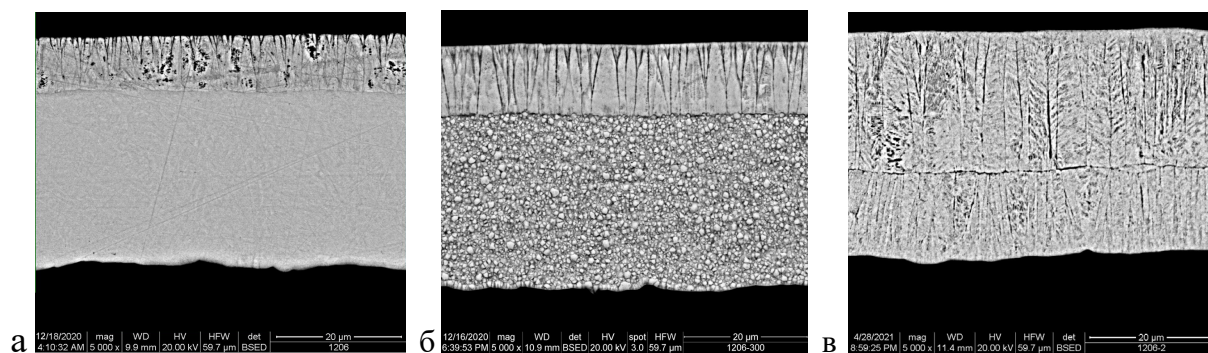


Рис.1 РЭМ-изображения поперечного сечения аморфно-кристаллической ленты в исходном состоянии (а), после ИТО (б) и после ЭИО длительностью 1 мс (в)

Для проведения кристаллизации аморфного состояния быстрозакалённых аморфно-кристаллических лент из сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ без высокотемпературной выдержки для сохранения характеристик исходного кристаллического слоя была изготовлена экспериментальная установка, позволяющая проводить термообработку тонких быстрозакалённых аморфных и аморфно-кристаллических тонких лент путём пропускания через образец одиночного или нескольких импульсов электрического тока (электроимпульсная обработка – ЭИО). Для проведения ЭИО лент была разработана и изготовлена оснастка, в которую запаивалась обрабатываемая лента в прямолинейном состоянии для проведения ЭИО в «свободном состоянии», а также была изготовлена оснастка для проведения ЭИО образцов с приложением растягивающей нагрузки («напряжённом состоянии»).

Были проведены обработки трёх аморфно-кристаллических лент из сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ с ЭОПФ с различным соотношением аморфного и кристаллического слоёв. На полученных экспериментальных образцах замерялось формоизменение при термоциклировании в интервале мартенситных превращений, результаты формоизменения и особенности полученных образцов заносились в лабораторный журнал. После визуального

осмотра и проверки эффектов памяти формы были отобраны типовые образцы для проведения комплексного исследования структурных характеристик методами металлографии, РЭМ и рентгеноструктурного анализа, а также исследования температурных интервалов фазовых мартенситных превращений методом ДСК.

Исследования показали, что при ЭИО с длительностью менее 1000 мс микроструктура лент в поперечном сечении имеет неоднородное распределение кристаллов по толщине ленты: вблизи поверхностей ленты формируется структура из столбчатых кристаллов, а в объеме ленты присутствуют единичные или сгруппированные крупные кристаллы. В приповерхностных областях лент формируются кристаллы со столбчатой структурой, а в средней части формируются крупные кристаллы. Столбчатые кристаллы от поверхности уходят во внутреннюю часть ленты до кристаллов, сформированных в объеме ленты, при этом формируется неоднородная граница. Доля столбчатых кристаллов растет с уменьшением длительности ЭИО и наблюдаются области, в которых столбчатые кристаллы соприкасаются в центральной части ленты, при этом между ними формируется ровная граница раздела. При ЭИО с длительностью 10 мс и менее начинается уменьшение поперечных размеров кристаллов – столбчатые кристаллы утоняются, а крупные кристаллы разбиваются на более мелкие. При электроимпульсной термообработке в нагруженном состоянии доля столбчатых кристаллов, соприкасающихся в средней части возрастает, также при увеличении нагрузки наблюдается их искривление.

Отмечается, что столбчатые кристаллы с неконтактной стороны формируются из исходного кристаллического слоя и повторяют его кристаллографическую ориентацию. Кристаллографические рефлексы с неконтактной поверхности ленты имеют нестандартное расположение основных рефлексов структуры типа В19 в области 58-65 градусов, а пики с меньшей интенсивностью располагаются в области 28-32 градусов. Кристаллографические рефлексы с контактной стороны ленты после электроимпульсной термообработки аналогичны рефлексам, полученным после изотермической обработки. Наблюдаются рефлексы фазы В19, расположенные в области 38-46 градусов (основные), и менее явные рефлексы в области 58-65 градусов.

Исследования ДСК показали, что наличие в структуре распределения разных типов кристаллов согласуется с калориметрическими эффектами и их стадийностью при мартенситных превращениях.

Во всех кристаллизованных образцах наблюдается ярко выраженный однократный ЭПФ, однако при ЭИО аморфно-кристаллических лент с приложением нагрузки в полученных кристаллических образцах наблюдается ЭОПФ с иным характером, чем был в исходном состоянии: в низкотемпературном состоянии (мартенситном) лента изогнута в сторону исходно аморфного слоя (начальное состояние); при нагреве выше

температуры начала аустенитного превращения лента начинает распрямляться и затем изгибается в другую сторону (в сторону исходно кристаллического слоя); при последующем охлаждении ниже температуры окончания мартенситного превращения лента принимает начальную форму. Данный ЭОПФ многократно повторяется. Такая реализация ЭОПФ формируется из-за растяжения образца при ЭИО, характерная величина наблюдаемого ЭОПФ (радиус кривизны изгиба) увеличивается при увеличении нагрузки при ЭИО и толщине исходного кристаллического слоя.

Таким образом, в работе было показано, что ЭИО слоистых аморфно-кристаллических лент сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ с приложением нагрузки позволяет модифицировать эффекты памяти формы.

Исследования проводились в рамках гранта РФФИ (проект №19-72-00145).

Анализ микроструктуры и поверхности сплавов TiNi после коррозионных испытаний в различных средах

Чуракова А.А.^{1,2}, Каюмова Э.М.³, Исхакова Э.И.²

¹Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

³Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия

e-mail: churakovaa_a@mail.ru

Сплавы с эффектами памяти формы широко используются в качестве функциональных материалов в различных отраслях [1]. Коррозионная стойкость во многом определяется степенью дефектности материала и особенностями имплантации его в организм человека как одного из самых активных носителей агрессивных сред. Ткани представляют сложную биологическую систему, реагирующую на введение имплантата изменением собственной структуры вплоть до физико-механических разрушений. Поэтому важно знать особенности коррозионного поведения, влияющие на биохимическую и биомеханическую совместимость с тканями организма. Одним из лучших медицинских металлических материалов с памятью формы является никелид титана, поверхность которого предохраняется оксидной пленкой, обуславливающей его высокую коррозионную стойкость в биологических средах. После имплантации TiNi в организм на поверхности оксидной пленки титана адсорбируется кальций и фосфор, приводящие к образованию фосфатной пленки, близкой по составу к апатиту. Такая защита в биологических средах ставит TiNi в особое привилегированное положение. Использование сплавов на основе никелида титана в медицине и технике стимулировало широкие исследования электрохимического поведения и коррозионной стойкости этих материалов в различных агрессивных средах [2].

Сплавы TiNi активно изучаются на протяжении десятилетий, были получены важные данные по микроструктуре, механическим и функциональным свойствам данных сплавов в различных структурных состояниях. Но практически отсутствуют данные по коррозионным и электрохимическим свойствам сплавов TiNi.

В качестве материалов исследования были выбраны двухкомпонентные сплавы системы TiNi. Застехиометрические сплавы $Ti_{49.1}Ni_{50.9}$, $Ti_{49.0}Ni_{51.0}$, обогащенные никелем. Данные сплавы имеют ОЦК решетку, упорядоченную по типу B2 (CsCl) и фазу, обогащенную никелем Ti_2Ni_3 , при этом температуры мартенситных превращений $M_H=3^\circ C$, $M_K=-60^\circ C$, $A_H=-25^\circ C$, $A_K=27^\circ C$; $M_H=-8^\circ C$, $M_K=-37^\circ C$, $A_H=5^\circ C$, $A_K=29^\circ C$; $M_H=-26^\circ C$, $M_K=-50^\circ C$, $A_H=-27^\circ C$, $A_K=-5^\circ C$, где M_H , M_K – температуры начала и конца прямого мартенситного превращения, а A_H , A_K , соответственно, обратного. Для формирования твердого раствора на основе TiNi и устранения

предыстории получения материала осуществляли закалку сплавов из области гомогенности (от 800 °С) в воду. Средний размер зерен закаленных сплавов составил: $Ti_{49,2}Ni_{50,8}$, $Ti_{49,1}Ni_{50,9}$ – 20 мкм, $Ti_{49,0}Ni_{51,0}$ – 35 мкм. После закалки образцы были деформированы путем равноканального углового прессованием по режиму Вс (6 проходов) при $T = 450^\circ\text{C}$ для формирования ультрамелкозернистой структуры. Для выявления микроструктуры исходного никелида титана использовали травитель следующего состава: 60% H_2O + 35% HNO_3 + 5% HF .

В качестве коррозионных сред использовались следующие растворы: 1 М HCl , 3 М HCl , 5 М HCl , 1 М H_2SO_4 , 3 М H_2SO_4 , 5 М H_2SO_4 . Растворами, имитирующими биологические среды, выступали 0,9% $NaCl$, раствор Рингера (6,5 г $NaCl$, 0,42 г KCl и 0,25 г $CaCl_2$ на 1000 мл дистиллированной воды), раствор Хэнкса (8 г/л $NaCl$; 0,185 г/л $CaCl_2 \cdot 2H_2O$; 0,4 г/л KCl ; 0,06 г/л, KH_2PO_4 ; 0,1 г/л $MgCl_2 \cdot 6H_2O$; 0,06 г/л $MgSO_4 \cdot 7H_2O$; 0,48 г/л $Na_2HPO_4 \cdot 12H_2O$; 0,35 г/л $NaHCO_3$). Исследование микроструктуры проводилось на оптическом металлографическом микроскопе OLYMPUS GX51, структурные исследования образцов после коррозионных испытаний проводились с использованием растрового электронного микроскопа (РЭМ) JEOL JSM-6490LV. Съемка проводилась при ускоряющем напряжении 20кВ с использованием SE детектора, инвертированного микроскопа AXIO OBSERVER Z1M в режиме темного поля. Перед испытаниями заранее приготовленные образцы взвешивали на аналитических весах, образцы помещали в эксикатор, где испытуемый образец контактировал с агрессивной средой при температуре (25 °С). Образцы помещали в раствор на определенное время до появления заметных следов коррозии. После испытаний образцы промывали водой, обрабатывали спиртом, сушили и взвешивали на аналитических весах. Параметры электрохимической коррозии определяли с использованием универсального потенциостата-гальваностата Р-2Х «Элинс» в режиме линейной развертки потенциала от -500 до 600 мВ со скоростью 100 мВ/с в рабочих растворах: 1М HCl , 3М HCl , 1М H_2SO_4 , 3М H_2SO_4 в электрохимической ячейке с разделением рабочего электрода и электрода сравнения электролитическим ключом. В качестве электрода сравнения использовали стандартный хлорсеребряный электрод ЭСр10101, вспомогательного – стальной прутки. Исследование качественного элементного состава продуктов коррозии на поверхности образцов были получены с рентгеновского фотоэлектронного спектрометра JPS-9010MX (Jeol Ltd., Japan), оснащенного монохроматическим источником рентгеновского излучения $Mg\ K\alpha$ ($h\nu = 1253,6$ эВ) с ускоряющим напряжением до 10 кВ и током до 10 мА. Фазовый состав исследовали на рентгеновском дифрактометре Rigaku Ultima IV ($U=40$ кВ и $I=35$ мА) в диапазоне углов $2\theta=30-120^\circ$ для определения угловых координат рентгеновских линий и параметров решетки В2-аустенита. Проведены исследования показали, что коррозионное поведение сплавов в растворах

кислот может существенно отличаться в зависимости от состава сплава и сформированной микроструктуры.

Исследования показали, что в активирующих электролитах растворение никелида титана определенного химического состава с ультрамелкозернистой структурой облегчено по сравнению с крупнозернистым состоянием (например, в сплаве $Ti_{49.1}Ni_{50.9}$). Высокая активность никелида титана с УМЗ структурой объясняется тем, что сплав с УМЗ структурой имеет малый размер зерна и большую протяженность границ, а также высокую плотность дислокаций по границам, что приводит к ускорению процесса растворения при взаимодействии с активирующими электролитами. Увеличение концентрации раствора приводит к значительному ускорению коррозионных процессов в сплавах с высоким содержанием Ni, в том числе до полного растворения образцов (5 М H_2SO_4 после 3-х суток выдержки; 5 М HCl составляет значительную долю коррозионных повреждений через 30 дней). Выявлено, что растворы 1 М серной и соляной кислот после месячного воздействия не меняют цвет и не обнаруживают осадков, а растворы 5 М соляной и серной кислот приобретают фиолетовый, а затем зеленый цвет, что связано с преобладанием высвобождение ионов титана (+4) и никеля (+2). Процесс растворения сплава $Ti_{49.1}Ni_{50.9}$ в кислых растворах при высоких концентрациях протекает по механизму питтинга, что подтверждается фотографиями представленных микроструктур.

Исследование в сплаве $Ti_{49.0}Ni_{51.0}$ трех структурных состояний (крупнозернистое, ультрамелкозернистое, ультрамелкозернистое с предварительным старением) показали, что коррозионное разрушение в растворах кислот происходит наиболее интенсивно в крупнозернистом состоянии. Формирование ультрамелкозернистой структуры снижает скорость коррозии данного сплава, однако предварительное старение и выделение частиц старения повышают скорость коррозии по сравнению с состоянием без старения.

Рентгенофазовый анализ сплава $Ti_{49.1}Ni_{50.9}$ позволил определить наличие высокой доли (более 50 %) гидрида TiNi в ультрамелкозернистом состоянии после коррозионных испытаний, тогда как доля гидрида в крупнозернистом состоянии составляет 6.35 %, что значительно меньше, чем в ультрамелкозернистом состоянии. Сплав TiNi содержит фазу Ti_2Ni , обогащенную Ti, как в крупнозернистом, так и в ультрамелкозернистом состоянии. Причем в ультрамелкозернистом состоянии ее доля в 1,1 раза выше, кроме того в этом состоянии почти в 2 раза выше объемная доля мартенситной B19' фазы, что вероятнее всего также оказывает на такое перераспределение фаз в процессе коррозионных испытаний.

Коррозионный процесс в сплаве $Ti_{49.1}Ni_{50.9}$ в случае электрохимической коррозии протекал на всех образцах и во всех растворах в виде появления питтингов, а также с продуктами коррозии при испытании в растворах

H_2SO_4 с разной концентрацией. При испытаниях в растворе 1М HCl заметно увеличение размера питтингов с 1,9 мкм в закаленном состоянии до 2,2 мкм в деформированном состоянии. С повышением концентрации раствора размеры питтингов растут: в закаленном состоянии – 2,3 мкм, а в деформированном – 3,5 мкм. При испытаниях в H_2SO_4 максимального размера питтинги достигают в деформированном состоянии (8,6 мкм) при концентрации 3М. На всех образцах после испытаний в растворах H_2SO_4 (1М и 3М) наблюдаются продукты коррозии в виде соединений серы округлой формы, кроме деформированного образца с концентрацией 3М H_2SO_4 . На данном образце продукты коррозии имеют прямоугольную форму и в длину достигают 3,7 мкм. Результаты рентгеновского фотоэлектронного спектрометра показали, что при испытаниях в растворах HCl с разной концентрацией продуктов коррозии не обнаружено. На поверхности наблюдаются спектры кислорода в соединении C=O, титан в соединении TiO_2 и никель. При испытаниях в растворах H_2SO_4 везде наблюдаются пики серы. В деформированных образцах спектры более выражены (1М – интенсивность более 6000, 3М – интенсивность менее 8000), чем в закаленных (1М – интенсивность менее 6000, 3М – интенсивность 8000).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-73-00289, <https://rscf.ru/project/22-73-00289/>)

- [1] Shape Memory Alloys: Fundamentals, Modeling and Applications. / Ed. by: V. Brailovski, S. Prokoshkin, P. Terriault and F. Trochu. Montreal: Ecole de technologie superieure (ETS), Universite du Quebec, Canada, 2003. 851 p.
- [2] P. Rocher, L. El Medawar, J.-C. Hornez, M. Traisnel, J. Breme, H.F. Hildebrand, Scripta Materialia. **50**, 255 (2004).

Магнитокалорические свойства сплавов Гейслера $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{22-x}R_x$ ($x=0, 1.5$; $R=Cu, Zn$) и $Ni_{50}Mn_{35}Al_2Sn_{13}$ в циклических магнитных полях

Хизриев Ш.К., Гамзатов А.Г., Батдалов А.Б., Алиев А.М.
 Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
 e-mail: shakhban1994@gmail.com

Сплавы Гейслера с эффектом памяти формы являются одними из ярких представителей материалов с гигантскими значениями магнитокалорического эффекта, что делает их перспективными кандидатами в технологии магнитного охлаждения [1], кроме того в них наблюдается интересное сочетание магнитных и магнитоструктурных фазовых переходов, что делает их исследование интересными и с фундаментальной точки зрения.

В данной работе приводятся результаты экспериментального исследования магнитных, магнитокалорических свойств системы $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{22-x}A_x$ (где $x=0, 1.5$; $A=Zn, Cu$) и ленточного образца $Ni_{50}Mn_{35}Al_2Sn_{13}$. Как правило в сплавах Гейслера с магнитоструктурными фазовыми переходами наблюдается прямой ($\Delta T > 0$) при T_C и обратный ($\Delta T < 0$) вблизи T_S магнитокалорический эффект [2].

Приведенная на рис.1 зависимость намагниченности от температуры указывает на сложную картину фазовых превращений, происходящих в исследуемых образцах при изменении температуры. При понижении температуры исходный образец переходит в магнитоупорядоченную фазу при $T_C=378$ К, а замещенные композиции – при $T_C=361$ К. При дальнейшем понижении T наблюдаются аномалии, связанные со структурными превращениями аустенит-мартенсит, при этом основное магнитное

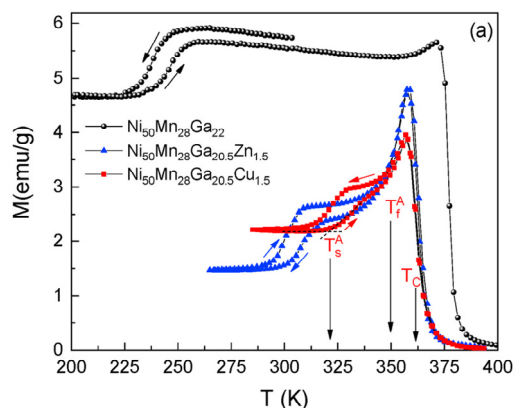


Рис. 1 Температурные зависимости намагниченности для $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{22-x}R_x$ ($x=0, 1.5$; $R=Cu, Zn$).

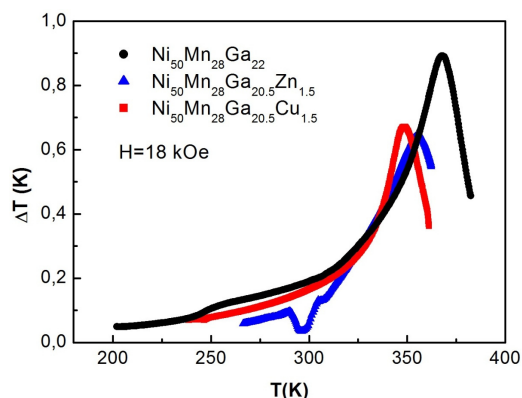


Рис. 2 Зависимость ΔT_{ad} от температуры в циклических магнитных полях 1.8 Тл для $Ni_{50}Mn_{28}Ga_{22-x}A_x$ (где $x=0, 1.5$; $A=Zn, Cu$)

состояние остается ферромагнитным, но с меньшей величиной намагниченности, т.е. можно говорить о метамагнитоструктурном фазовом переходе. Наблюдаемые температурные гистерезисы указывают на то, что аномалии связаны с структурными переходами.

На рис. 2 представлены результаты прямых измерений МКЭ в магнитном поле 1.8 Тл в режиме нагрева. Максимальная величина МКЭ наблюдается для исходного состава $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{28}\text{Ga}_{22}$ и равна $\Delta T_{\text{max}} \approx 0.9$ К. На рис. 3 представлены температурные зависимости магнитокалорического эффекта для ленточного образца в циклическом магнитном поле 1.8 Тл в разных режимах нагрева/охлаждения. Из графика видно, что величина обратного магнитокалорического эффекта зависит от скорости нагрева/охлаждения, чем выше скорость нагрева/охлаждения, тем выше величина обратного эффекта [3-4].

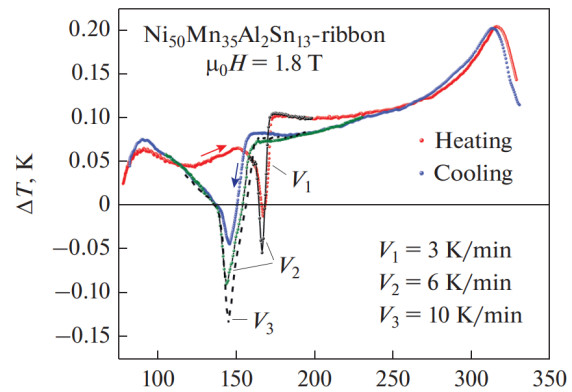


Рис. 3 Зависимость ΔT_{ad} от температуры в циклических магнитных полях 1.8 Тл для $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Al}_2\text{Sn}_{13}$.

Исследование выполнено за счет средств Российского научного фонда (проект № 22-19-00610, <https://rscf.ru/en/project/22-19-00610/>)

- [1] V. Franco, J. S. Blázquez, B. Ingale, et al, Annual Review of Materials Research **42**, 305 (2012).
- [2] M. Khan, I. Dubenco, et al., J. Appl. Phys. **97**, 10M304 (2005).
- [3] A.G. Gamzatov, et al., Appl. Phys. Lett. **113**, 172406 (2018).
- [4] A.G. Gamzatov, et al., J. Mater. Sci. **56**, 15397 (2021).

Магнитокалорические свойства Ni-Mn-Ga-Sn-Cu в циклических магнитных полях до 1.8 Т

Гаджиев А.Б.¹, Гамзатов А.Г.¹, Алиев А.М.¹, Мусабиров И.И.²

¹ Институт Физики им. Х. И. Амирханова, ДФИЦ РАН, Махачкала, 367015, Россия

² Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

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

Исследование магнитотермических свойств и явлений в магнитных материалах имеет огромное значение для решения фундаментальных проблем магнетизма и физики твердого тела, а также для технических приложений. На сегодняшний день, магнитокалорический эффект (МКЭ), главный претендент в качестве основы для твердотельного магнитного охлаждения за счет высокой энергоэффективности и безопасности использования [1]. Большой научный интерес к семейству сплавов Гейслера вызван тем, что в данных материалах в области фазовых переходов наблюдаются такие свойства как эффект памяти формы, гигантский магнитокалорический эффект (прямой и обратный), баррокалорический эффект, сверхупругость, гигантское магнитосопротивление и др.

В данной работе представлены результаты исследования температурной зависимости магнитокалорического эффекта в системе Ni-Mn-Ga-Sn-Cu, в циклических магнитных полях до 1.8 Тл. Серия сплавов Ni-Mn-Ga-Sn-Cu были изготовлены вакуумной индукционной переплавкой в керамическом и графитовом тигле [2]. Были получены образцы с разной микроструктурой. Протокол измерения магнитокалорического эффекта в циклических полях был следующим: образец охлаждали до температуры ниже конечной точки мартенситного превращения, а затем к нему прикладывали переменное магнитное поле 1.8 Тл с постоянной скоростью нагрева (исследования повторялись для разных скоростей нагрева/охлаждения 1.5 К/мин и 5 К/мин). Получены результаты влияния микроструктуры и скорости температурного сканирования на магнитокалорический эффект в области мартенситного и магнитного фазовых превращений в системы Ni-Mn-Ga-Sn-Cu.

Исследование выполнено за счет средств Российского научного фонда (проект № 22-19-00610, <https://rscf.ru/en/project/22-19-00610/>)

[1] K. G. Sandeman. *Magnetics Technology International, Showcase*, 32–34, (2011).

[2] I.I. Musabirov, I.M. Safarov, R.M. Galeev, R.Yu. Gaifullin, A.B. Gadjev, A.M. Aliev, A.V. Mashirov, V.V. Koledov, R.R. Mulyukov. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*. 6, 246–254 (2021).

Поиск новых подходов к криогенной и сверхпроводниковой технике нового поколения на основе фазовых переходов в магнитных полях

Шавров В.Г.¹, Бычков И.В.², Ветошко П.М.¹, Коледов В.В.¹, Каманцев А.П.¹, Карпухин Д.А.¹, Колесов К.А.¹, Кошкидько Ю.С.¹, Кузнецов А.С.¹, Кузьмин Д.А.², Маширов А.В.¹, Петров А.О.¹, Прокунин А.В.¹, Суслов Д.А.¹, Таскаев С.В.², Утарбекова М.В.² фон Гратовски С.В.¹, Ari-Gur P.³

¹ ИРЭ им.В.А.Котельникова РАН, Москва, Россия,

e-mail: shavrov@cplire.ru

² Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

e-mail: bigv@mail.ru

³ Western Michigan University, Kalamazoo, USA

email: pnina.ari-gur@wmich.edu

Недавние исследования магнитокалорического эффекта получили широкое распространение во всем мире из-за потенциальных применений твердотельных магнитных материалов для высокоэффективного охлаждения при комнатной температуре. Недавно авторы доклада предложили новую концепцию исследования и применения магнитокалорических материалов, которая предполагает создание и исследование перспективных твердотельных систем магнитного охлаждения для сверхпроводящих источников сильного магнитного поля с высоким КПД. В рамках этой концепции предлагается в сильных магнитных полях, в широком диапазоне температур исследовать магнитные и магнитоструктурные фазовые переходы (ФП) и магнитокалорические свойства новых материалов из сплавов на основе металлов 3d и 4f методами прямых измерений с помощью разработанных авторами методов. Предлагаются исследования сверхпроводящих материалов и постоянных сверхпроводящих магнитов на основе высокотемпературных сверхпроводников. Также будут исследованы термодинамические и электрические свойства функциональных материалов с использованием новых методов. На основе полученных результатов о свойствах этих материалов в сильных магнитных полях будут экспериментально воспроизведены и исследованы циклы магнитного охлаждения. Следующим этапом будет исследование поддержания сильных магнитных полей и сверхпроводимости на основе технологии криогенного твердотельного магнитного охлаждения с использованием функциональных материалов с фазовыми переходами. Результаты исследований откроют перспективу применения новых принципов магнитного твердотельного охлаждения для создания низких температур и сильных магнитных полей для микроэлектроники, медицины, энергетики, магнитного транспорта и

многих других областей. В последние годы поиски решения проблемы эффективного преобразования тепловой энергии в другие формы привлекли внимание многих исследователей к изучению свойств твердых так называемых калорических материалов, на которые сильно влияют внешние поля, и в которых наблюдаются изменения энтропии в различных внешних полях: магнитном (магнитокалорический эффект (МКЭ)), электрическом (электрокалорический эффект), упругом (эластокалорический эффект) и других. Большие надежды возлагаются на применение твердых материалов в плане достижения чрезвычайно высокого уровня коэффициента преобразования тепловой энергии в другие формы и наоборот. Это необходимо потому, что использованием газообразных рабочих тел в современных холодильниках и тепловых насосах достигло своего предела эффективности. Ведется поиск новых принципов охлаждения на основе твердотельных калорических материалов. В нашей предыдущей работе сформулирован и разработан оригинальный подход, основанный на использовании магнитокалорического охлаждения для поддержания низкой температуры сверхпроводящего постоянного магнита, являющегося источником сильного магнитного поля, что необходимо для повышения МКЭ. После этого за рубежом появились публикации по криогенному магнитокалорическому охлаждению с использованием сверхпроводящих магнитов. Однако результаты, полученные авторами, имеют существенные отличия и преимущества. Так, в рамках авторы разработали экспериментальные методы исследования процессов магнитокалорического охлаждения в полях до 10 Тл и испытали элементы холодильника, реализующие цикл, близкий к циклу Карно. В настоящей работе предлагается продолжить создание и экспериментальное исследование новых твердотельных материалов с прямым и обратным МКЭ в криогенном диапазоне температур, создание и исследование миниатюрных сверхпроводящих магнитов, способных удерживать сильные магнитные поля до 10 Тл и более в течение длительного времени, а также исследование процесса магнитокалорического охлаждения в одно- и многоступенчатой схеме криогенного холодильника в цикле Карно. Также планируется провести экспериментальную и теоретическую оценку КПД твердотельного процесса охлаждения.

Работа поддержана РФФ, грант № 20-19-00745-П.

Изучение влияния циклического магнитного поля на магнитокалорический эффект в системе La-Fe-Co-Si

Абдулкадирова Н.З.¹, Гамзатов А.Г.¹, Батдалов А.Б.¹, Алиев А.М.¹,
Gebara² P.

¹ *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*

² *Institute of Physics, Czestochowa University of Technology, Czestochowa, 42-200, Poland*
e-mail: nnurizhat@mail.ru

Несмотря на то, что процесс создания твердотельных магнитных холодильников переходит в практическую плоскость (созданы и описаны десятки типов холодильных машин с разными характеристиками, с разными рабочими магнитными образцами, разной конструкцией и т.д. [1]), технология магнитного охлаждения столкнулась с множеством проблем, требующих дальнейших исследований. Как известно, созданные к настоящему времени прототипы магнитных холодильных машин работают на относительно низких частотах 4-10 Гц. Более того, одной из основных проблем, сдерживающих начало массового производства магнитных холодильников, является отсутствие экспериментальной базы для исследования свойств магнитных материалов в условиях длительного циклического воздействия магнитного поля. Кроме того, такие исследования представляют большой интерес с фундаментальной точки зрения. Изучение влияния циклического магнитного поля на магнитные и магнитокалорические свойства в настоящее время проводится отдельными научными группами в мире [2-4].

В данной работе представлены результаты исследования влияния частоты магнитного поля (до 20 Гц) и долговременного циклического воздействия магнитных полей (0.62, 1.2, 1.8 и 8 Т) на магнитокалорические характеристики системы La-Fe-Co-Si [5].

- [1] B. Yu, M. Liu, et al, Inter. Journal of Refrigeration, **33**, 1029 (2010)
- [2] J. Döntgen, J. Rudolph, et al, Appl. Phys. Lett. **106**, 032408 (2015)
- [3] A.M. Aliev, A. B. Batdalov, et al, Appl. Phys. Lett. **109**, 202407 (2016)
- [4] Aliev, A. Batdalov, et al, J. Alloys Compd. **676**, 601 (2016)
- [5] Feng-xia Hu, Bao-gen Shen, et al, Appl. Phys. Lett. **78**, 3675 (2001)

Structural properties systems of Al and Fe₃O₄ layered thin films

Ahmadova Kh.N.^{1,2}, Jabarov S.H.¹, Aliyeva Sh.N.^{1,2}

¹ *Institute of Physics, ANAS, Baku, AZ1143, Azerbaijan*

e-mail: x.khalilova@rambler.ru

² *Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku, AZ1010 Azerbaijan*

It is known that Al is widely used in modern aviation technologies. Recently, there has been a need to apply electromagnetic absorbing materials. Due to the absence of magnetic properties in aluminum, it was necessary to apply the Al-Fe system. It is known that iron and many of its oxide compounds have strong magnetic properties. Therefore, extensive studies are conducted in the direction of studying ferromagnetic and antiferromagnetic properties in these materials [1-3]. Among these materials, a high absorption capacity was also observed. One such material is iron oxide nanoparticles [4,5].

In this work layered thin films of nano-sized Al and Fe₃O₄ powders were obtained. Thin films of different thicknesses were obtained by thermal sputtering method on a glass substrate. Al with a particle size of $d = 50$ nm and Fe₃O₄ with a particle size of $d = 30$ nm were taken as the initial material. First, a layer of aluminum was deposited on the glass, and then an iron oxide layer was deposited on it to obtain a layered system consisting of thin layers. Depending on the operating mode, thin films with a thickness of 30 and 60 nm were obtained. Layered thin films of the Al-Fe₃O₄ system were obtained on the glass. During the X-ray diffraction study, it was determined that Al and Fe₃O₄ substances can keep their crystal structure in thin layers with a thickness of $d = 30$ and 60 nm. X-ray diffraction spectra obtained under normal conditions are shown in figure 1. The main reason for this is explained by their cubic symmetry crystal structure with Fm-3m and Fd-3m space groups, respectively. In the X-ray diffraction spectra, it was determined that the maxima corresponding to Al crystals correspond to the (111) and (200) atomic planes, and the maxima corresponding to Fe₃O₄ crystals correspond to the (044) atomic plane. The obtained experimental results revealed that Al and Fe₃O₄ retain their structural properties in layered thin layers of the Al-Fe₃O₄ system, and it is possible to apply $d \geq 30$ nm thick layers in electronics.

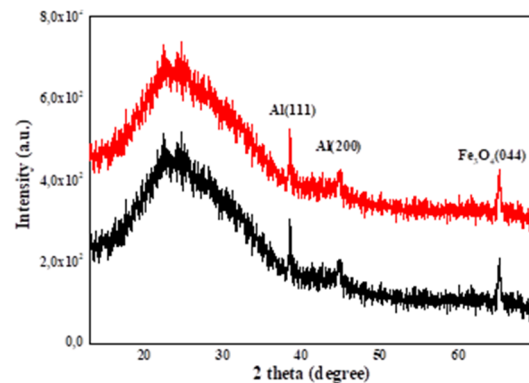


Fig.1 X-ray diffraction spectra

- [1] Y.I. Aliyev, T.M. Ilyashi, A.O. Dashdemirov, M.R. Allazov, A.V. Trukhanov, Y.G. Asadov, S.H. Jabarov, N.T. Dang, The structural and vibrational

- properties of Ni-doped chalcopyrite CuFeS_2 , *Journal of Ovonic Research*, 14, 2, p.165-169, (2018).
- [2] N.O. Golosova, D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, L.S. Dubrovinsky, A.I. Mammadov, R.Z. Mehdiyeva, S.H. Jabarov, H.-P. Liermann, K.V. Glazyrin, T.N. Dang, V.G. Smotrakov, V.V. Eremkin, B.N. Savenko, Structural, magnetic and vibrational properties of multiferroic GaFeO_3 at high pressure, *Journal of Alloys and Compounds*, 684, p.352-358, (2016).
- [3] N. A. Abdullaeva, Kh. V. Aligulieva, V. N. Zverevd, Z. S. Alieva, I. R. Amiraslanova, M. B. Babanly, f, Z. A. Dzhakhangirli, E. N. Alieva, Kh. N. Akhmedova, T. G. Mamedov, M. M. Otrokovg, A. M. Shikini, N. T. Mamedov, and E. V. Chulkov, The Charge Transport Mechanism in a New Magnetic Topological Insulator $\text{MnBi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_4$, *Physics of the Solid State*, 2021, Vol. 63, No. 8, pp. 1206–1211. (2021).
- [4] A.V. Trukhanov, V.G. Kostishyn, L.V. Panina, S.H. Jabarov, V.V. Korovushkin, S.V. Trukhanov, E.L. Trukhanova, Magnetic properties and Mössbauer study of gallium doped M-type barium hexaferrites, *Ceramics International*, 43, 15, p.12822-12827, (2017).
- [5] F.G. Agayev, S.H. Jabarov, G.Sh. Ayyubova, A.V. Trukhanov, S.V. Trukhanov, M.N. Mirzayev, T.G. Naghiyev, N.T. Dang, Ferrimagnetic-paramagnetic phase transition in $\text{BaFe}_{11.7}\text{In}_{0.3}\text{O}_{19}$ compound, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 33, p.2867-2873, (2020).

Acknowledgments This work was supported by the International Innovation Center of Nanotechnology Commonwealth of Independent States (CIS) under Grant No. №23-101.

Структурное исследование соединений $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$

Набиева А.Х.

*Институт физики Министерство Науки и Образования Азербайджанской Республики,
Баку, Азербайджан
e-mail: aynurnabiyeva@inbox.ru*

Сложные оксиды с функциональными свойствами имеют широкий спектр применения. Среди этих соединений перовскит и антиперовскит соединения занимают особое место. Наблюдения магнитоэлектрических, ферромагнитных и пьезоэлектрических свойства являются основными преимуществами перовскита и перовскитоподобных соединений [1,2].

Соединение BaMnO_3 считается наиболее изученным материалом. Расчеты электронной структуры показывают, что это соединение обладает металлическими свойствами при нормальных условиях [3]. Расчет соединения LaMnO_3 методом DFT показал, что это соединение обладает полупроводниковыми свойствами, а ширина запрещенной зоны составляет $E_g = 2$ эВ [4]. В зависимости от ширины запрещенной зоны становится возможным управление полупроводниковыми свойствами при частичном замещении атомов La атомами Ba в твердых растворах $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$. Однако эти системы недостаточно изучены. В данной работе были синтезированы твердые растворы $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$, исследованы поверхность и кристаллическая структура полученных кристаллов $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$, $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$ и $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$.

Структура поликристаллов $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$, $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$ и $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ исследована методом рентгеновской дифракции при комнатной температуре. На первом этапе образцы измельчали в порошок лабораторной ступкой и затем анализировали на рентгеновском дифрактометре с параметрами излучения 40 кВ, 40 мА, $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$, $\text{CuK}\alpha$ (D8 Advance, Bruker, Германия). Спектры анализировали методом Ритвельда в программах Fullprof и Origin [5,6]. Спектры дифракции рентгеновских лучей, полученные для этих соединений при комнатной температуре и при нормальных условиях условия приведены на рисунке 1.

Установлено, что эти соединения синтезируются в однофазном состоянии и имеют идеальную структуру перовскита с пространственной группой Pm-3m . При частичном замещении атомы бария могут замещать атомы лантана. Проведен анализ результатов рентгенофазового исследований и объяснены полученные различия в структуре образцов. Установлено, что различия в значениях параметров решетки и размерах кристаллитов связаны с различие ионных радиусов атомов лантана и бария в двухвалентном случае.

При анализе спектров установлено, что параметры решетки соединений $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$, $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$ и $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ составляют a

$= b = c = 3.9016 \text{ \AA}$, $a = b = c = 3.9052 \text{ \AA}$, and $a = b = c = 3.9072 \text{ \AA}$ соответствует значениям.

Полученные результаты показали, что система $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$ ($x = 0.03, 0.27$ и 0.5) обладает достаточно высокой симметрией. Такая кристаллическая структура важна для магнитных материалов. Потому что атомы должны находиться в своих идеальных положениях для возникновения дальнего магнитного порядка.

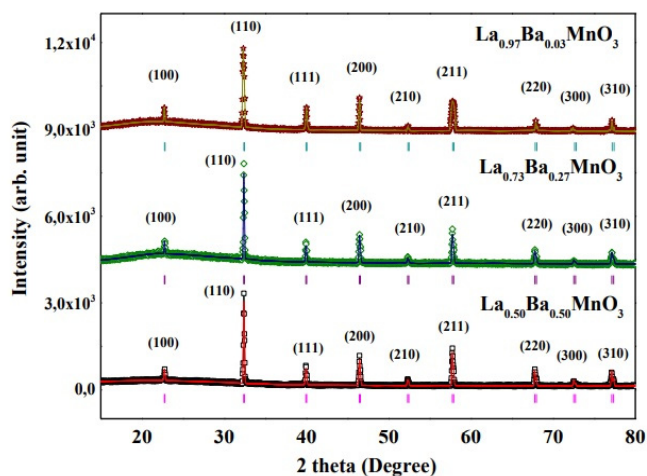


Рис.1. Рентгеновские спектры.

- [1] B.Enkhmend, I.Khishigdemberel, N.Jargalan, D.Sangaa, *Advanced Physical Research* **3**, 59 (2021).
- [2] S.H.Jabarov, R.T.Aliyev, N.A.Ismayilova, *Modern Physics Letters B* **35**, 2150211 (2021).
- [3] R.F.Hashimov, N.A.Ismayilova, F.A.Mikailzade, A.O.Dashdemirov, A.V.Trukhanov, S.V.Trukhanov, Y.I.Aliyev, E.B.Asgerov, S.H.Jabarov, N.T.Dang, *Modern Physics Letters B* **32**, 1850186 (2018).
- [4] R.F.Hashimov, *Advanced Physical Research* **3**, 35 (2021).
- [5] G.Sh.Ayyubova, *Advanced Physical Research* **2**, 108 (2020).
- [6] J.Rodriguez-Carvajal, *Physica B: Condensed Matter* **192**, 55 (1993).

Исследование поверхности кристаллов $\text{Ca}_{0.5}\text{Nd}_{0.5}\text{MnO}_3$ и $\text{Ca}_{0.5}\text{Pr}_{0.5}\text{MnO}_3$

Хахвердиева З.Э.

*Институт физики Министерства Науки и Образования Азербайджанской Республики,
Баку, Азербайджан
e-mail: haxverdiyevaz@mail.ru*

Среди перовскитов широко изучены манганиты AMnO_3 . Интересные физические свойства наблюдаются у этих соединений при высоком давлении, высокой и низкой температуре. Установлено, что манганиты в основном проявляют антиферромагнитные свойства при низких температурах [1,2]. В результате структурных исследований установлено, что в отличие от мультиферроиков с магнитоэлектрическими свойствами соединения AMnO_3 , обладающие только магнитными свойствами, имеют кристаллическую структуру с более высокой симметрией. Среди этих соединений есть соединения в кубической, гексагональной, ромбоэдрической и орторомбической системах.

В твердых растворах $\text{A}'_{1-x}\text{A}'_x\text{MnO}_3$ синтезируются различные структуры в зависимости от ионного радиуса катионов A' и A' . Недавно в соединениях $\text{La}_{0.63}\text{Sr}_{0.37}\text{MnO}_3$ и $\text{La}_{0.72}\text{Sr}_{0.28}\text{MnO}_3$ при низких температурах обнаружен как ферромагнетизм, так и антиферромагнетизм. Нейтронографические исследования показывают, что в дифракционных спектрах появляются новые максимумы в области температур $T < 260$ К, что соответствует образованию новой антиферромагнитной фазы. Под действием высокого давления снижается либо температура Кюри (для ферромагнитной фазы), либо температура Нееля (для антиферромагнитной фазы) [3].

Известно, что интересные оптические и электрические свойства наблюдаются у кристаллов, содержащих редкоземельные элементы [4,5]. Очень важно синтезировать манганиты, содержащие атомы этих металлов, и изучить их физические свойства. Потому что у этих материалов можно наблюдать интересные оптические, электрические и магнитные свойства. В настоящей работе были синтезированы соединения $\text{Ca}_{0.5}\text{Nd}_{0.5}\text{MnO}_3$ и $\text{Ca}_{0.5}\text{Pr}_{0.5}\text{MnO}_3$, проведены анализ структуры их поверхности и элементный анализ. Определен ряд физико-химических свойств этих материалов.

Структуру поверхности, размерные эффекты и анализ микросостава объектов исследования изучали на сканирующем электронном микроскопе. Исследования проводились на приборах SEM, ZEISS, SIGMA VP. Полученные изображения были проанализированы и получены сведения о поликристаллах соединений $\text{Ca}_{0.5}\text{Nd}_{0.5}\text{MnO}_3$ и $\text{Ca}_{0.5}\text{Pr}_{0.5}\text{MnO}_3$. Определялось количество химических элементов в пробах, указывалось процентное содержание металлов Ca, Nd, Pr, Mn и кислорода.

Из морфологии соединений $\text{Ca}_{0.5}\text{Nd}_{0.5}\text{MnO}_3$ и $\text{Ca}_{0.5}\text{Pr}_{0.5}\text{MnO}_3$ видно, что образцы были синтезированы в виде твердых поликристаллов. Было определено, что $\bar{d} \approx 30$ мкм при условии размера кристаллитов $d = 10\text{-}50$ мкм. Эти характеристики характерны для керамических материалов типа перовскита.

Для более точного изучения свойств соединений $\text{Ca}_{0.5}\text{Nd}_{0.5}\text{MnO}_3$ и $\text{Ca}_{0.5}\text{Pr}_{0.5}\text{MnO}_3$ также был проведен химический элементный анализ образцов. Установлено, что соединение $\text{Ca}_{0.5}\text{Nd}_{0.5}\text{MnO}_3$ синтезировано с достаточно высокой степенью чистоты, и в нем обнаружены только элементы Ca, Nd, Mn и O, образующие структуру. Установлено, что процентное содержание этих элементов соответствовало Ca - 12,25 %, Mn - 31,55 %, Nd - 35,58 %, O - 20,62 %. Аналогичные результаты были получены для соединения $\text{Ca}_{0.5}\text{Pr}_{0.5}\text{MnO}_3$. Кристалл был синтезирован с достаточно высокой чистотой, в нем были обнаружены только структурообразующие элементы Ca, Pr, Mn и O. Определено, что процентное содержание этих элементов соответствовало Ca - 12,11 %, Mn - 30,62 %, Pr - 36,81 %, O - 20,46 %.

- [1] S.H.Jabarov, N.T.Dang, S.E.Kichanov, D.P.Kozlenko, L.S.Dubrovinsky, J.-G.Park, S.Lee, A.I.Mammadov, R.Z.Mehdiyeva, B.N.Savenko, N.X.Nghia, L.H.Khiem, N.T.T.Lieu, L.T.P.Thao, *Materials Research Express* **6**, 086110 (2019).
- [2] S.V.Trukhanov, A.V.Trukhanov, N.T.Dang, V.S.Zakhvalinskii, D.P.Kozlenko, S.E.Kichanov, S.V.Ovsyannikov, S.H.Jabarov, An.V.Trukhanov, E.L.Trukhanova, D.A.Vinnik, S.A.Gudkova, *Materials Research Express* **5**, 086108 (2018).
- [3] N.M.Belozerova, S.E.Kichanov, Z.Jirák, D.P.Kozlenko, M.Kačenka, O.Kaman, E.V.Lukin, B.N.Savenko, *Journal of Alloys and Compounds* **646**, 998 (2015).
- [4] B.G.Tagiyev, O.B.Tagiyev, A.I.Mammadov, V.X.Quang, T.G.Naghiyev, S.H.Jabarov, M.S.Leonenya, G.P.Yablonskii, N.T.Dang, *Physica B: Condensed Matter* **478**, 58 (2015).

Фрактальные агрегации В Ni-Zn феррошпинелях

Мехтиев Т.Р.¹, Алиева Ш.Н.^{1,2}, Джабаров С.Г.¹, Юсибова И.Ф.¹,
Ахмедова Х. Н.^{1,2}, Кичанов С.Е.³, Руткаускас А.В.³, Гасанова Х. А.^{1,2}.

¹ *Институт Физики, Министерство Науки и Образования, Баку, AZ 1143, Азербайджан
e-mail: aliyeva.shahla2020@gmail.com*

² *АГУНП, Баку, AZ 1010 Азербайджан*

³ *ОИЯИ, Дубна, 141980, Россия*

Метод малоуглового рассеяния непосредственно предоставляет ценную информацию о структуре частиц, явлениях агрегации, параметрах и свойствах фрактальной кластерной структуры. Анализ научных публикаций, показывает большой интерес к исследованиям которые изучают феррошпинели, наноразмерное состояние которых открыло перед исследователями не только разнообразные размерные эффекты, но и возможностями направленного изменения свойств наноструктур, путем создания определенных конфигураций нанокластеров, обеспечивающих необходимые межкластерные взаимодействия [1,2]. Одно из основных размерных свойств магнитных нанокластеров, является суперпарамагнетизм, который проявляется в виде тепловых флуктуаций магнитного момента кластера как целого без потери им магнитного упорядочения [3]. Детальные исследования показали, что способность магнитных частиц агрегировать [4,5], существенно отражается на свойствах этих систем и необходимо понимание процессов агрегации [6].

Поверхности магнитных частиц нанопорошков и пленок $Ni_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ составов, исследовались методами АСМ и МУРР. По результатам АСМ-исследований размеры кластерных образований при температуре 300К для составов ферритов $NiFe_2O_4$, $Ni_{0.75}Zn_{0.25}Fe_2O_4$, $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$, $Ni_{0.25}Zn_{0.75}Fe_2O_4$ составляли, соответственно: 29нм, 23нм, 2нм и 23нм [7]. Исследования малоуглового рассеяния при температуре 300К подтверждают наблюдаемую в АСМ-экспериментах зависимость фрактальных размеров от составов ферритов. Как показано в работе [7], эта зависимость коррелирует с концентрациями Fe^{3+} и Fe^{2+} ионов, и, следовательно, отражает роль косвенного обменного взаимодействия. Механизм образования агрегатов влияет на размерность фрактальных объектов. Агрегация изменяет распределение размеров магнитных наночастиц. Увеличение эффекта агрегации магнитных наночастиц приведет к увеличению распределения частиц по размерам, которое можно рассматривать как логарифмически нормальное распределение при анализе данных рассеяния. Фрактальная размерность агрегатов, определенная в данной работе, указывала на то, что в системе магнитных наночастиц реализуется реакционно-ограниченный механизм агрегации кластеров. В этом механизме столкновения частиц образуют более компактный агрегат из-за медленной диффузии частиц в

центр агрегата. Слоистый агрегат будет иметь фрактальную размерность ближе к двум. Учитывая, что слоистый квазидвумерный агрегат будет иметь фрактальную размерность D_f ближе к двум, можно предположить формирование трехмерных агрегатов с дополнительным магнитным взаимодействием между первичными наночастицами. Как правило, распределение таких агрегатов по размерам имеет симметричную кривую Гаусса с аддитивными значениями среднего и стандартного отклонения. В качестве альтернативы расчет логарифмически нормального распределения может использовать модель среднего значения переменной и стандартного отклонения с логарифмической дисперсией. Анализ экспериментальных результатов с использованием логарифмически нормального распределения для частиц магнетита дал диапазон размеров агрегатов 4-21 нм, что коррелирует с распределениями частиц по размерам, полученными для ферритов $Ni_{1-x}Zn_xFe_2O_4$. Затем отдельные кластеры взаимодействуя друг с другом, образуют двумерный фрактальный агрегат. Существование большего размера кристаллических агрегатов вполне объясняется в рамках модели нейтрализации заряда. В результате агрегат может стать больше в результате уменьшения электростатических сил отталкивания между частицами.

- [1] Andreas Michels Magnetic small-angle neutron scattering of bulk ferromagnets. *J. Phys.:Condens. Matter* 26 (2014) 383201 (41pp),
- [2] Gea Fitria, Arum Patriati, Mujamilah, Maria Christina Prihatiningsih, Edy Giri Rachman Putra, and Siritwat Soontaranon Hierarchical Structure of Magnetic Nanoparticles - Fe_3O_4 -Ferrofluids Revealed by Small Angle X-Ray Scattering. *Indones. J. Chem.*, 2021, 21 (3), 635 – 643, DOI: 10.22146/ijc.59114
- [3] Louis Néel: His multifaceted seminal work in magnetism: Louis Néel : son œuvre fondatrice à multiples facettes en magnétisme. *Comptes Rendus Physique* 20(2019), p.631-649, <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2019.07.003>.
- [4] Котиков Д.А., Ивановская М.И. Использование золь-гель-метода для синтеза различных структурных модификаций оксида железа (III) в наноразмерном состоянии // *Вестн. Белорус. ун-та. Сер.2.* 2005, № 2, С.11-1
- [5] Адакимчик А.В., Горбачук Н.И., Ивановская М.И., Котиков Д.А., Лукашевич М.Г., Оджаев В.Б., Сидоренко Ю.В.. Электропроводность пленочных композитов $SiO_2-\gamma-Fe_2O_3$ во влажном воздухе // *Журн. физической химии* 2010, № 4, С. 773-778.
- [6] Wu, Y., Yang, X., Yi, X., Liu, Y., Chen, Y., Liu, G., and Li, R., 2015, Magnetic nanoparticles for biomedicine applications, *J. Nanotechnol. Nanomed. Nanobiotechnol.*, 2, 003.
- [7] Aliyeva, Sh.N., Aliyeva, Y.N., Nadjafov, A.I., Hasanov, I.S., Huseynov, E.K., Mehdiyev, T.R. EPR and SPM studies of (Zn-Ni) ferrites. *PSS(c)*. 12(6), 615–619 (2015). <https://doi.org/10.1002/pssc.201400273>.

Влияние размера зерен и частоты магнитного поля на величину магнитокалорического эффекта манганита $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.2}\text{Ca}_{0.1}\text{MnO}_3$

Кадырбардеев А.Т., Гамзатов А.Г., Алиев А.М., Абдулкадирова Н.З.

Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: anvar.kadirbardeev@gmail.com

Современные исследования магнитокалорических свойств материалов достигли такого уровня, что простого измерения адиабатического изменения температуры ΔT_{ad} и изотермического изменения энтропии ΔS_{iso} уже недостаточно для анализа пригодности материала в качестве рабочего тела в технологии магнитного охлаждения. Для наиболее всестороннего рассмотрения необходимо исследовать не только вышеприведенные параметры, но и поведение их в условиях приближенных к эксплуатационным, так, например, материал в системе магнитного охлаждения должен постоянно подвергаться воздействию переменного магнитного поля определенной частоты, поэтому нужно учитывать влияние частоты на магнитокалорический эффект (МКЭ), а также временное воздействие на величину МКЭ. Таких работ, посвященных временным и частотным зависимостям МКЭ в последнее время становится все больше, однако они не так многочисленны из-за малого числа групп, занимающихся прямыми измерениями магнитокалорического эффекта в переменных магнитных полях. Например, в работе [1] было обнаружено, что с ростом частоты магнитного поля величина магнитокалорического эффекта падала во всех исследованных материалах, однако для FeRh падение составило около 10%, тогда, как у NiCoMnGa МКЭ почти полностью подавлялось,

Вышеприведенные параметры связаны с магнитными свойствами вещества, которые сильно зависят от размерных и поверхностных эффектов. Влияние этих эффектов рассматривалось в манганитах и других поликристаллических соединениях и, например, было обнаружено, что воздействие дефектов поверхности возрастает с уменьшением размеров частиц. Также сильно зависят магнитные свойства материала и от уровня легирования, в работе [2] было обнаружено, что намагниченность падает, а температура Кюри смещается в сторону низких температур при уменьшении размера зерна, вследствие увеличения доли немагнитной поверхности, однако в работе [3] были получены обратные результаты – увеличение намагниченности и температуры Кюри с уменьшением зерна, было выдвинуто предположение, что данное противоречие объясняется уровнем легирования редкоземельного элемента.

Совокупность выше представленных факторов, ведет к тому, что изучение магнитных материалов становится комплексной задачей, где требуется не только установить наличие какого-либо эффекта, но и

исследование его поведения в предполагаемых условиях использования. Поэтому в представленной работе было проведено исследование влияния величины размера зерен и частоты магнитного поля на значения МКЭ в манганитах с составом $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.2}\text{Ca}_{0.1}\text{MnO}_3$, для лучшего понимания поведения данного свойства при различных внешних (магнитное поле) и внутренних (размер зерен) параметрах.

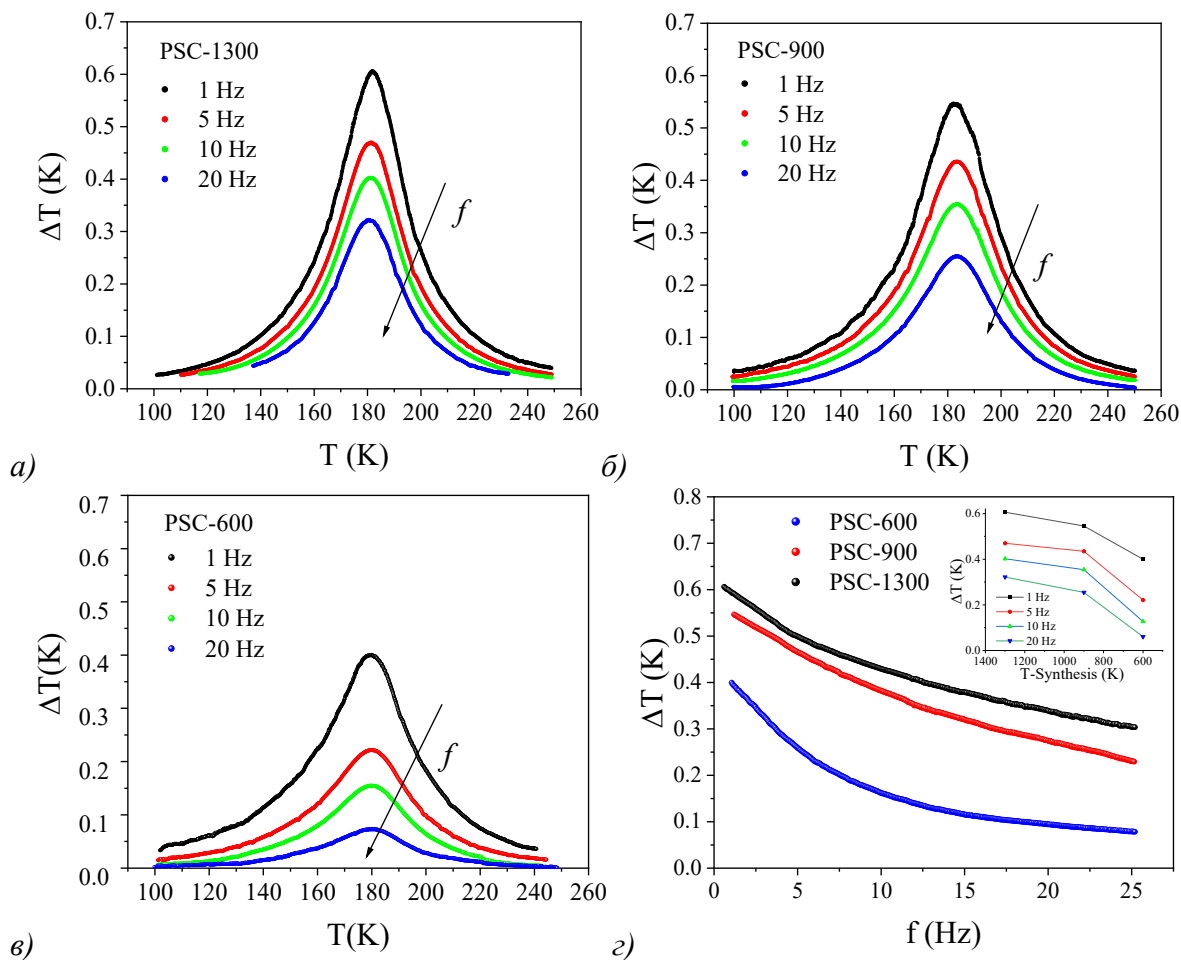


Рис.1. Температурная зависимость МКЭ образца PSC-1300(а), 900(б), 600(в) в поле $H = 12$ kOe с частотами 1, 5, 10 и 20 Hz, г) частотная зависимость максимума МКЭ в вышеприведенных образцах.

Исследование выполнено за счет средств Российского научного фонда (проект № 22-19-00610, <https://rscf.ru/en/project/22-19-00610/>).

- [1] A.M. Aliev, A.B. Batdalov, L.N. Khanov, V.V. Koledov, V.G. Shavrov, I.S. Tereshina, S.V. Taskaev, J. Alloys Compd. 676, (2016) 601–605
- [2] R. D. Sánchez, J. Rivas, C. Vázquez-Vázquez, A. López-Quintela, M. T. Causa, M. Tovar, S. Oseroff, Appl. Phys. Lett. 68 (1996) 134
- [3] N. Zhang, W. Ding, W. Zhong, W. Yang, You. Du, J. Phys.: Condens. Matter 9 (1997) 4281.

Ab-initio расчёты электронных и магнитных свойств наносистем Fe/Gr/h-BN, антиферромагнитных и ферромагнитных ван-дер-ваальсовых многослойных структур

Дунаевский С.М.^{1,2}, Михайленко Е.К.^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский институт» ПИЯФ, Гатчина, Россия

e-mail: mikhailenko_ek@rnpri.nrcki.ru

²СПбГЭТУ «ЛЭТИ» им. В.И.Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

Одним из актуальных направлений в исследовании функциональных материалов является изучение ультратонких слоёв ферромагнетиков (Fe и Co), обладающих перпендикулярной магнитной анизотропией (“perpendicular magnetic anisotropy”, PMA) [1]. Такие монослои синтезируют путем интеркаляции магнитных атомов под графен, выращенный на поверхности (111) гексагонального никеля [2], оксиде кремния SiO [3], иридии [4] и ряде других подложек.

В данной работе представлены первые результаты расчёта электронных свойств структур вида Fe/h-BN/Fe и Fe/Gr/h-BN методом теории функционала плотности, представленной в свободно распространяемом вычислительном пакете Quantum Espresso. Поскольку поверхность (111) железа, графен (Gr) и гексагональный нитрид бора (h-BN) формируют слои с близкими значениями межуточного расстояния вдоль поверхности (~ 2.49 Å), расчёты производились для различных вариантов взаимного расположения этих слоёв.

Расчёты производились в три этапа – вычисление равновесных параметров структуры, затем получение значений магнитных моментов на атомах и вычисление магнитной анизотропии. Для последней требуется вычисление значений зонной энергии E^{band} в нескольких точках, соответствующих различным углам ориентации магнитного момента ($\theta = 0^\circ - 90^\circ$) относительно нормали к поверхности слоя.

Для выяснения равновесной магнитной конфигурации требуется вычислить зонную энергию E^{band} при параллельной и перпендикулярной ориентации магнитного момента относительно нормали к поверхности (ось Z). При этом требуется учитывать кроме зонной ещё и энергию диполь-дипольного взаимодействия E^{md} , что было сделано отдельными от Quantum Espresso вычислениями.

Данная работа является первым шагом на пути к исследованию магнитных и транспортных свойств наноструктур Fe/Gr/h-BN и nMBT(N)/h-BN, а также других гетероструктур на основе графена (Gr), нитрида бора BN, изоляторов Черна (CI) и топологических изоляторов (TI).

[1] B. Dieny, M. Chshiev, Rev. Mod. Phys. **89**, 025008 (2017).

[2] G. Bertoni, L. Calmels, A. Altibelli, V. Serin, Phys. Rev. B **71**, 075402 (2004).

[3] C. Berger, Z. Song, et al., J. Phys. Chem. B **108**, 19912 (2004).

[4] N. Rougemaille, A.T. N'Diaye, et al., Appl. Phys. Lett. **101**, 142403 (2012).

Структурные и магнитные свойства Y-замещенного BiFeO₃

Михайлов В.И., Тарасенко Т.Н., Ковалев О.Е., Кравченко З.Ф.
ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк, Россия
e-mail: t.n.tarasenko@mail.ru

Феррит висмута BiFeO₃ (BFO) со структурой перовскита является мультиферроиком I-го типа, т.е. его магнитное упорядочение не связано с его электрическим упорядочением. Он имеет температуру антиферромагнитного упорядочения $T_N = 643$ К и температуру его электрического упорядочения $T_C = 1083$ К. BFO обладает модулированной геликоидальной спиновой структурой с периодом 62 нм, наличие которой не позволяет существование отличного от нуля магнитного момента, что приводит к невозможности проявления магнито-электрического эффекта [1]. Поскольку магнитные свойства феррита висмута тесно связаны с локальной структурой октаэдра FeO₆, их можно усилить путем подавления спиновой циклоиды. Одним из путей ее разрушения является легирование редкоземельными ионами в А-позициях структуры перовскита. Немагнитный ион Y³⁺ с гораздо меньшим ионным радиусом, чем у иона Bi³⁺, увеличивая угол наклона октаэдров FeO₆, должен сильно дестабилизировать ромбоэдрическую структуру R3c, характерную для "чистого" BFO. Изменение кристаллической симметрии от ромбоэдрической R3c к орторомбической Pbnm наблюдалось при со-замещении в А- и В-позициях BFO [2]. Как показали авторы работы [2], замена ионов Bi на Y и Fe на Mn при малых концентрациях замещения приводит к разрушению спиновой циклоиды в структуре R3c Bi_{1-x}Y_xFe_{1-x}Mn_xO₃. Это в свою очередь ведет к росту намагниченности M(x) до некоторой критической концентрации x_c.

Для выяснения роли немагнитного иона Y³⁺ в изменении величины удельной намагниченности BFO нами была синтезирована серия образцов твердых растворов Bi_{1-x}Y_xFeO₃ при (0.1 ≤ x ≤ 0.4) золь-гель методом с использованием оксидов Y₂O₃, Bi₂O₃ марки ОСЧ и карбонильного железа. В качестве комплексообразователя использовалась лимонная кислота, этиленгликоль – в качестве гелеобразующего компонента. Полученные нанопорошки (~40 нм) были спрессованы в таблетки толщиной 1.5 мм и диаметром 8 мм. Таблетки мультиферроиков отжигались при температуре 850 °С (10 минут). Кристаллическую структуру и фазовый состав полученных образцов определяли рентгенодифракционным методом на дифрактометре ДРОН-1.5 в Си K_α-излучении.

Рентгенофазовый анализ образцов Bi_{1-x}Y_xFeO₃ (Рис. 1) показал, что в них, помимо ромбоэдрической фазы R3c, наблюдается наличие орторомбической фазы (пространственная группа Pbnm).

При $x \leq 0.1$ структура образца незначительно отличается от исходной ромбоэдрической структуры “чистого” ВFO. С дальнейшим ростом степени замещения ($x > 0.15$) наряду с рефлексами структуры $R3c$ появляются рефлексы структуры $Pbnm$.

Особенности магнитного упорядочения $Bi_{1-x}Y_xFeO_3$ с ростом замещения x были изучены, анализируя петли перемагничивания $M(H)$ для $x=0.1, 0.2, 0.3$ (рис.2). Запись петель перемагничивания производилась с помощью вибрационного магнитометра усиление ферромагнитных свойств в Y-замещенном $BiFeO_3$: $M_s(0.2)=6.3$ emu/g, $M_s(0.3)=11.7$ emu/g. Значение M_s для $x=0.2$ примерно равно значению $M_s=6.277$ emu/g для $x=0.2$, полученному в работе [3].

В [4] подчеркивается роль вторичных фаз в усилении магнитных свойств в составах ВFO, допированных редкоземельными ионами ($R = Y, Ho$ и Er). Наряду со структурным искажением, благоприятствующим скосу спинов, подразумевается наличие фазы редкоземельных ферритов-гранатов $R_3Fe_5O_{12}$, дающей вклад в температурную зависимость намагниченности. Для проверки варианта присутствия в керамике $Bi_{1-x}Y_xFeO_3$ ($x = 0.2$ и 0.3) кластеров с большими ферромагнитными моментами, которые упорядочиваются параллельно в магнитном поле, содержащих, например, железо-иттриевый гранат [3,4], по той же золь-гель технологии был синтезирован $Y_3Fe_5O_{12}$ из нитратов при 1150 C (20 часов). Но как видно из Рис. 1, нет четкого совпадения положений основных рефлексов структуры $Y_3Fe_5O_{12}$ с рефлексами исследуемых мультиферроиков $Bi_{1-x}Y_xFeO_3$. Т.о., структурные искажения, создаваемые присутствием немагнитного иона Y^{3+} , ответственны за возникновение магнитного момента ВFO.

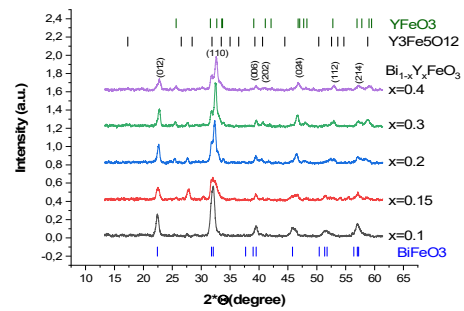


Рис.1 Рентгенодифрактограммы образцов мультиферроиков $Bi_{1-x}Y_xFeO_3$ при комнатной температуре.

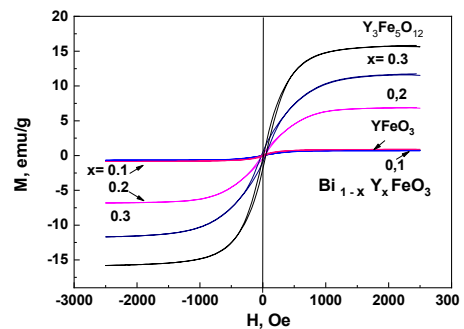


Рис.2 Петли магнитного гистерезиса образцов твердых растворов $Bi_{1-x}Y_xFeO_3$ для различных концентраций замещения x при $T=293$ K.

- [1] А.П.Пятаков, А.К.Звездин, Успехи физ. наук **182**, № 6, 593 (2012).
 [2] R.Pandey, L.K.Pradhan et al., Ceramic International, **44** (15), 18608 (2018).
 [3] В.Л.Фенг, Н.Хуе, Zh.X.Xiong, Chin. Science Bull., **55**, № 4-5, 452 (2010).
 [4] С.Nayek, et al., J.Appl.Phys., **115**, 073902 (2014).

Стабильность магнитокалорического эффекта в циклических магнитных полях в сплавах $\text{Ni}_{43.18}\text{Mn}_{45.15}\text{In}_{11.67}$ и $\text{Ni}_{49.3}\text{Mn}_{40.4}\text{In}_{10.3}$

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

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: hanov82@mail.ru

² Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
e-mail: kaman4@gmail.com

Для использования в качестве рабочего тела твердотельных магнитных холодильников, магнитокалорические материалы должны обладать определенными свойствами, основным из которых является то, что материал должен обладать гигантской величиной магнитокалорического эффекта (МКЭ). Для практического применения необходимо добавить еще одно требование к свойствам материалов. Это – стабильность магнитокалорических свойств в условиях длительного воздействия циклических полей, так как именно в таких условиях будет функционировать рабочее тело твердотельного магнитного холодильника. Поэтому актуальной задачей является поиск материалов с гигантским и стабильным в циклических магнитных полях магнитокалорическим эффектом.

Одними из таких перспективных материалов считаются сплавы Гейслера Ni-Mn-In, в которых наблюдаются значительные по величине значения МКЭ вблизи комнатных температур. В этих сплавах наблюдается интересное сочетание магнитных и структурных фазовых переходов. Отличительной особенностью МКЭ в материалах с магнитоструктурными фазовыми переходами является то, что в таких материалах под влиянием магнитного поля наряду с изменением магнитной энтропии происходит изменение энтропии решетки, что при совпадении знаков вкладов, приводит к «гигантским» адиабатическим изменениям температуры. В данном сообщении приводятся результаты экспериментального исследования магнитокалорических свойств сплавов $\text{Ni}_{43.18}\text{Mn}_{45.15}\text{In}_{11.67}$ и $\text{Ni}_{49.3}\text{Mn}_{40.4}\text{In}_{10.3}$ в циклических магнитных полях амплитудой до 8Т в интервале температур 77 – 350 К. Прямые измерения МКЭ в циклических магнитных полях проводилось модуляционным методом.

Временные зависимости МКЭ в данных сплавах в циклическом магнитном поле амплитудой 1.8 Т были исследованы при температурах максимумов эффекта, а также при температурах ниже и выше максимумов эффекта. Для таких исследований образцы предварительно охлаждали в нулевом магнитном поле, потом нагревался до требуемых температур, и только после установления температуры включали циклическое магнитное поле. Каждая кривая измерялась в течение одного часа, с количеством

циклов приложения магнитного поля 720. Температуры образцов поддерживалась с точностью $\pm 0.05\text{K}$.

На рис. 1 показаны временные зависимости МКЭ сплава $\text{Ni}_{43.18}\text{Mn}_{45.15}\text{In}_{11.67}$ в циклическом магнитном поле 1.8 Т в области магнитоструктурного фазового перехода. Как видно из рисунка приложение циклического поля приводит к уменьшению начальной величины МКЭ. На начальном участке наблюдается резкое уменьшение эффекта, в дальнейшем уменьшение эффекта продолжается, но с меньшей скоростью. В области максимума эффекта ($T=282.4\text{K}$) уменьшение величины МКЭ составляет около 31%. После каждого такого циклирования, образец охлаждали до температуры 77 К в нулевом магнитном поле, и измерялись температурные зависимости МКЭ. На температурных зависимостях МКЭ, измеренных в режиме нагрева после циклирования в магнитных полях при фиксированной температуре (рис. 2) в области фазового перехода, возникают дополнительные аномалии, которые исчезают с приближением к области аустенитной фазы. При переходе в аустенитную фазу происходит восстановление исходных свойств, и при последующих циклах измерения температурной зависимости мы имеем дело с образцом с исходными свойствами. Аналогичная картина наблюдается и для сплава $\text{Ni}_{49.3}\text{Mn}_{40.4}\text{In}_{10.3}$.

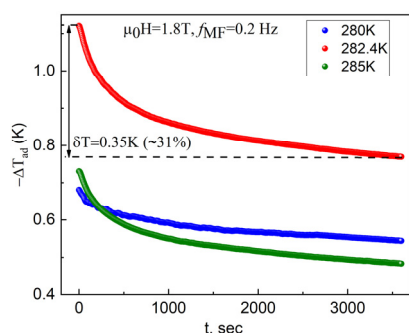


Рис.1 Временные зависимости МКЭ в сплаве $\text{Ni}_{43.18}\text{Mn}_{45.15}\text{In}_{11.67}$.

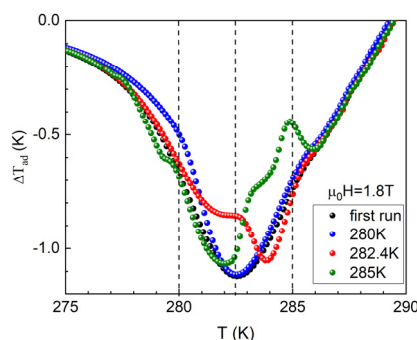


Рис.2 Температурные зависимости МКЭ в сплаве $\text{Ni}_{43.18}\text{Mn}_{45.15}\text{In}_{11.67}$.

По результатам экспериментального исследования МКЭ поликристаллических сплавов Гейслера $\text{Ni}_{43.18}\text{Mn}_{45.15}\text{In}_{11.67}$ и $\text{Ni}_{49.3}\text{Mn}_{40.4}\text{In}_{10.3}$ было обнаружено, что 720 циклов вкл/выкл. магнитного поля, приводит к уменьшению величины МКЭ в области МСФП, т.е. показывает нестабильность эффекта. Переход в аустенитную фазу восстанавливает исходные свойства.

Исследование выполнено за счет средств Российского научного фонда (проект № 22-19-00610).

Подходы к проблеме фрагментации твердотельных материалов при фазовых переходах

фон Гратовски С.В.¹, Коледов В.В.¹, Гречишкин Р.М.²

¹*ИРЭ им.В.А.Котельникова РАН, Москва, Россия,*

²*Тверской государственный университет, Тверь, Россия*
svetlana.gratowski@yandex.ru

Явление фрагментации конденсированных сред в процессе фазовых переходов давно привлекает внимание исследователей. Часто фрагментация затрудняет практическое применение функциональных материалов, так как приводит к частичному или полному разрушению образца, например, при воздействии внешнего магнитного поля на сплавы с гигантским магнетокалорическим эффектом и магнитной памятью формы, или электрического поля на сегнетоэлектрики с электрокалорическим эффектом и с электроуправляемым эффектом памяти формы. На рис. 1 для примера представлены микрофотографии, демонстрирующие наряду с возникновением и исчезновением мартенситных двойников, также зарождение и «залечивание»-дефрагментация микротрещины, в процессе фазового термоупругого мартенситного перехода в сплава Гейслера Ni-Mn-Ga.

В докладе дан обзор литературы в области рассмотрения фазовых переходов твердотельных материалах с позиции фрагментации, анализируются модели для ее описания и методы расчета.

Так, явление фрагментации металлов наблюдались в работах [1-6]. Нагрев кристаллов до температур, превышающих температуру Дебая в 1,5–2 раза, приводит к многократной генерации дислокаций, а их полигонизация — к самопроизвольному фрагментированию структуры при плавлении. Также фрагментация при фазовом превращении наблюдалась в [7-10], а в [11] для описания фрагментации конденсированных сред предлагается ее рассматривать как фазовый переход.

В работе [11] показано, что такой фазовый переход сплошной упругой среды аналогичен фазовому переходу разрушения сверхпроводящего состояния критическим магнитным полем. При этом при критических напряжениях или давлениях сплошная упругая среда подвергается фрагментации, в нее проникает поле плотности дислокаций – возникает вихрь тензора дисторсии, пропадает упругость и возникают пластические деформации. Поле плотности дислокаций представляется собой линейный дефект при фазовом переходе фрагментации сплошной упругой среды. В результате, в конденсированных телах образуются трещины и возникает фрагментация. То есть, согласно [11] фазовый переход фрагментации сплошной упругой среды связан с изменением градиентной симметрии поля тензора дисторсии.

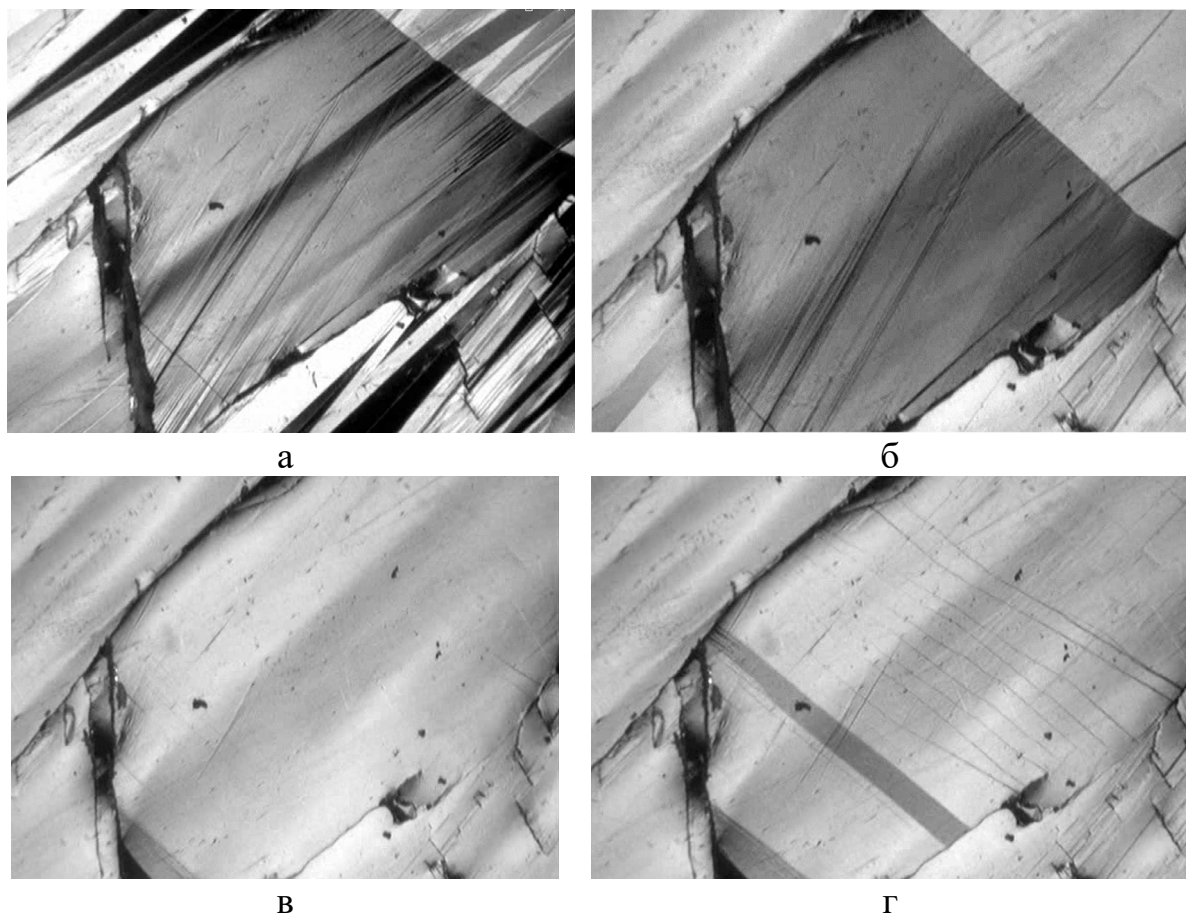


Рис. 1. Образование трещины (фрагментация) и ее частичное «залечивание»-дефрагментация в ходе термоупругого мартенситного перехода в поликристаллическом сплаве Гейслера Ni-Mn-Ga. (а) сплав в мартенситном состоянии. (б) переход в результате в аустенитную фазу. (в) аустенитное состояние сплава (трещина значительно уменьшилась). (г) Переход в мартенситную фазу при повторном охлаждении и рост трещины.

В нефрагментированной сплошной упругой среде тензор дисторсии пропорционален тензору напряжений. В при фазовом переходе фрагментации тензор дисторсии описывает пластические деформации с дислокациями. То есть, фрагментация сопровождается возникновением в тензоре деформации антисимметричных членов, определяющих поворот окрестности рассматриваемой точки абсолютно твёрдого тела. Также на важность учета поворотов в деформируемом и разрушающемся твердом теле в синергетическом подходе ряда работ по физической мезомеханики деформируемого твердого тела как сложной иерархической многоуровневой системы см., например, обзор [12].

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 22-19-00783.

- [1] А.П. Майборода, А.П. Шпак, Ю.А. Куницкий А. А. Спонтанная фрагментация металлов в области фазовых превращений // Усп. Физ. мет., 4, № 3: 123—233 (2003)].

- [2] Dukarov, S. V., Kryshal, O. P., Sukhov, V. N. (2015). Surface Energy and Wetting in Island Films. *Wetting and Wettability*, 169-206.
- [3] P. Kumar, J. Howarth and I. Dutta, "Electric Current Induced Flow of Liquid Metals: Mechanism and Substrate-Surface Effects" *J. Appl. Phys.* 115 (2014) 044915.
- [4] S. Talukder, P. Kumar and R. Pratap, "Electrolithography- A New and Versatile Process for Nano Patterning", *Scientific Reports* 5 (2015) Art # 17753
- [5] Дукаров, С. В., Сухов, В. Н., & Чурилов, И. Г. (2009). Особенности плавления металлических пленок на несмачиваемых поверхностях.
- [6] Sharma, M., Kumar, S., Pratap, R., Irzhak, A., Kumar, P., von Gratowski, S., Shavrov, V. (2019, August). Electric current driven formation of micro- and nano-sized beads in thin Cr films. In *2019 IEEE International Conference on Manipulation, Manufacturing and Measurement on the Nanoscale (3M-NANO)* (pp. 86-89). IEEE.
- [7] Худяев, С. И., Столин, А. М., & Маклаков, С. В. (1983). Тепловой взрыв в условиях фазового превращения. *Физика горения и взрыва*, 19(5), 85.
- [8] Ноткина, Е. А., Чижов, А. В., & Шмидт, А. А. (1998). Моделирование разрушения упруго-пластических материалов, допускающих фазовый переход. *Письма в ЖТФ*, 24(18), 91-95.
- [9] Spatschek, R., Müller-Gugenberger, C., Brener, E., & Nestler, B. (2007). Phase field modeling of fracture and stress-induced phase transitions. *Physical Review E*, 75(6), 066111.
- [10] Штремель М. А. (2004). Предельное состояние трещиноватой среды. *Физическая мезомеханика*, 7(6), 11-18.
- [11] Брагинский, А. Я. Взрыв и разрушение сплошной упругой среды как фазовый переход, связанный с изменением градиентной симметрии тензора дисторсии.
- [12] Панин, В. Е., Панин, Л. Е. (2004). Масштабные уровни гомеостаза в деформируемом твердом теле. *Физическая мезомеханика*, 7(4), 5-23.

Секция Б3

**Нелинейные явления и хаос
в конденсированных средах**

Критические параметры водных растворов моно-, ди-, три-пропиленгликолей и полипропиленгликоля-425

Поволоцкий И.И., Волосников Д.В., Скрипов П.В.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: iliyapov@rambler.ru

Водные растворы гомологов пропиленгликоля нашли применение в качестве теплоносителей, производстве растворителей, смазок, влагоудерживающих средств, используются в пищевой, косметической и фармацевтической отраслях.

Существует ряд работ, посвященных исследованию критических параметров чистых гликолей [1-4]. Теплоотдача в импульсном процессе, перегретые состояния, околоскритическая и сверхкритическая области водных растворов пропиленгликолей исследованы недостаточно. Это объясняется сложностью самого эксперимента и возможным термическим разложением молекул гликолей при температуре значительно ниже критической [3]. В данной работе исследовались критические параметры водных растворов гомологов пропиленгликоля: монопропиленгликоль ($M=76$, $n=1$), дипропиленгликоль ($M=134$, $n=2$), трипропиленгликоль ($M=192$, $n=3$) и полипропиленгликоль-425 (ППГ-425) ($M_n=425$, $n=7$), где M – молекулярная масса, M_n – среднечисленная молекулярная масса, n – степень полимеризации. Водные растворы первых трех гомологов пропиленгликоля обладают полной температурно-концентрационной совместимостью компонентов. Водный раствор ППГ-425 обладает областью несовместимости компонентов, то есть его фазовая диаграмма содержит линию равновесия жидкость-жидкость и нижнюю критическую температуру растворения (НКТР) (см. рис. 1) [5]. Не все известные методы измерения критических параметров жидкость-пар применимы к системам с НКТР.

Опыты поставлены методом управляемого импульсного нагрева проволочного зонда, погруженного в исследуемую жидкость [6]. Диаметр платиновой проволоки составляет ~ 20 мкм, длина ~ 10 мм. Скорость нагрева $\sim 10^6$ К/с. Начальные состояния растворов отвечают области их термодинамической устойчивости. Суть метода заключается в разогреве зонда прямоугольным импульсом электрического тока. В ходе импульсного нагрева регистрируются значения падения напряжения на зонде и величина

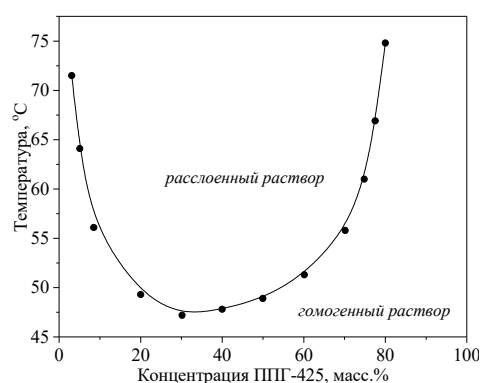


Рис.1 Фазовая диаграмма частично смешивающегося водного раствора ППГ-425.

тока в цепи зонда в зависимости от времени. Регистрация первичных данных сопровождается расчётом температуры зонда – термометра сопротивления. Быстродействие метода и его чувствительность к малым изменениям теплофизических свойств и фазового состояния раствора, сопровождающим изменение давления, обуславливают выполнимость поставленной задачи.

Водные растворы имеют перспективу в технологии сверхкритического водного окисления (СКВО), как способ утилизации опасных органических отходов и создания высокоэффективных безотходных технологий [7-9]. Также существует перспектива их применения в технологии сверхкритической экстракции, как способа повышения нефтеотдачи пластов [9]. Бинарные жидкости с областью несмесимости имеют предпосылки использования в качестве теплоносителей в процессах, где нельзя исключить вероятность мощного локального тепловыделения [6, 10]. Поэтому необходимы достоверные данные о теплофизических свойствах водных растворов технически важных веществ в широком диапазоне параметров, в частности в критическом состоянии. Развитие исследования будет направлено на выяснение обоснованности этих предпосылок и перспектив.

Авторы выражают благодарность Елиной Светлане Юрьевне за помощь в подготовке опытов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-19-00115-II, <https://rscf.ru/project/19-19-00115/>.

- [1] D. M. VonNiederhausern, L. C. Wilson, N. F. Giles, G. M. Wilson, J. Chem. Eng. Data **45**, 154 (2000).
- [2] D. M. VonNiederhausern, G. M. Wilson, N. F. Giles, J. Chem. Eng. Data **51**, 1990 (2006).
- [3] Е.Д. Никитин, ТВТ **36**, 332 (1998).
- [4] E.D. Nikitin, A.P. Popov, Fluid Phase Equilib. **472**, 56 (2018).
- [5] J. Pavlíček, J. Rotrekl, G. Bogdanić, I. Wichterle, P. Izák, J. Mol. Liq. **337**, 116336 (2021).
- [6] P.V. Skripov, A.A. Igolnikov, S.B. Rutin, A.V. Melkikh, Int. J. Heat Mass Transf. **184**, 122290 (2022).
- [7] Э. А. Базаев, А. Р. Базаев, А. А. Абдурашидова, ТВТ **47**, 215 (2009).
- [8] М. В. Федосов, А. Я. Пономарев, Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе №12, 242 (2014).
- [9] И. М. Абдулагатов, Х. С. Абдулкадырова, М. Н. Дадашев, ТВТ **31**, 830 (1993).
- [10] A. Igolnikov, P. Skripov, Energies **16**, 2109 (2023).

Спектральные и электрофизические свойства поликристаллических пленок (Cu/Ga-Se)

Гаджиев Т.М.¹, Романова О.Б.², Герасимова Ю.В.^{2,3}, Аплеснин С.С.^{2,4},
Алиев М.А.¹, Удод Л.В.^{1,4}

¹ Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: gadjiev_timur@mail.ru

² Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия
e-mail: rob@iph.krasn.ru

³ Институт инженерной физики и радиоэлектроники, СФУ, Красноярск, Россия
e-mail: jul@iph.krasn.ru

⁴ Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия
e-mail: apl@iph.krasn.ru

Наиболее перспективным для использования в тонкопленочных солнечных элементах является соединение $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$ или (CIGS), так как в этих соединениях путем изменения доли содержания элемента галлия можно варьировать ширину запрещенной зоны [1]. Солнечные элементы на основе CIGS достигают (КПД) до 21,7 % [2]. В работе [3] показано, что меняя соотношения Cu/Ga можно изменить ширину запрещенной зоны в системе CuGaSe_2 от 1.68 eV для (CuGaSe_2 , где Cu (Cu/Ga = 0.85)) до 1.85 eV для (CuGa_3Se_5 , Cu/Ga = 0.33). Эти соединения считаются достаточно перспективными материалами с точки зрения практического применения.

Цель нашей работы заключалась в отработке синтеза качественных поликристаллических пленок и изучение их спектральных и электрофизических свойств при изменении соотношения Cu/Ga в пленке Cu-Ga-Se.

Для синтеза поликристаллических пленок системы Cu-Ga-Se использовали двухэтапный метод управляемой селенизацией предварительно нанесенных на стеклянные подложки интерметаллических слоев Cu-Ga в двухзонной термодиффузионной установке с участием газа-носителя (N_2) реакционной компоненты (Se). Температура селенизации ($T_{\text{сел}}$) варьировалась в интервале $200 \text{ K} \leq T_{\text{сел}} \leq 550 \text{ K}$.

Исследования, проведенные методами рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии, показали, что качественные пленки со структурой халькоперита были получены при $T_{\text{сел}} = 500 \text{ K}$ Cu-Ga-Se с (Cu/Ga=0.15);

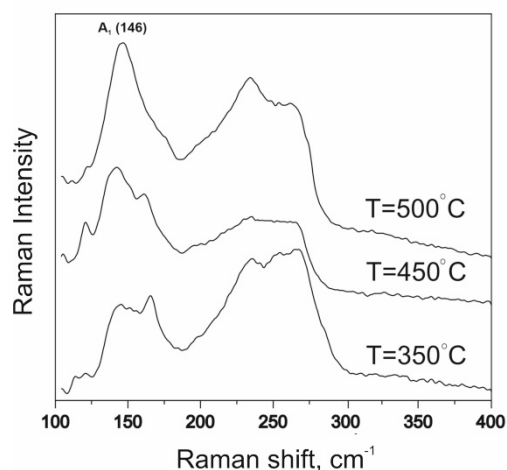


Рис.1 Спектры КРС при комнатной температуре пленок Cu-Ga-Se полученные при различных температурах селенизации

при $T_{\text{сел}} = 450$ К ($\text{Cu}/\text{Ga}=0.2$), а уже при $T_{\text{сел}} = 350$ К Cu-Ga-Se появляется фаза ($\text{Cu}_{0,25}\text{Ga}_{0,58}\text{Se}$).

Проведен анализ спектров комбинационного рассеяния (КР) поликристаллических пленок Cu-Ga-Se ($\text{Cu}/\text{Ga}=0.15$) и Cu-Ga-Se ($\text{Cu}/\text{Ga}=0.2$) при комнатной температуре (рис.1). Полученные данные были сопоставлены с расчетным спектром КР исходного халькопирита CuGaSe_2 .

На спектрах представленных на рис.1 обнаружено интенсивное колебание на частоте ~ 146 cm^{-1} , которое можно отнести к полносимметричной моде A_1 , типичной для соединений со структурой халькопирита. Интенсивность пиков КР сильно зависит от поверхности, морфологии и фазового состава пленок. Пленки синтезированные при $T_{\text{сел}} \leq 400$ К оказались с плохим структурным качеством и показывают слабый пик A_1 . В отличие от поликристаллических пленок синтезированных при $T_{\text{сел}} \geq 400$ К. Следует отметить, что в поликристаллических пленках Cu-Ga-Se с соотношением ($\text{Cu}/\text{Ga}=0.2$), колебание Cu-Se интенсивней, чем в плёнке Cu-Ga-Se ($\text{Cu}/\text{Ga}=0.15$). Скорее всего, это связано с содержанием меди. По результатам СЭМ в Cu-Ga-Se ($\text{Cu}/\text{Ga}=0.2$) содержания меди больше.

Изменение содержания меди и галлия в образце влияет и на проводящие свойства этих поликристаллических пленок. Синтезированные образцы разделились на два типа высокоомные Cu-Ga-Se ($\text{Cu}/\text{Ga} = 0.15$) (вставка к рис.2) и низкоомные Cu-Ga-Se ($\text{Cu}/\text{Ga} = 0.2$). Из температурных зависимостей удельного сопротивления установлено уменьшение сопротивления на восемь порядков при изменении соотношения Cu и Ga .

Установлено, что пленки Cu-Ga-Se с ($\text{Cu}/\text{Ga}=0.15$) обладают фоточувствительностью в отличие от образцов Cu-Ga-Se с ($\text{Cu}/\text{Ga}=0.2$) (рис.2). Эффект обнаружен при 320К, где согласно данным электрических свойств концентрация электронов на уровне химпотенциала резко возрастает.

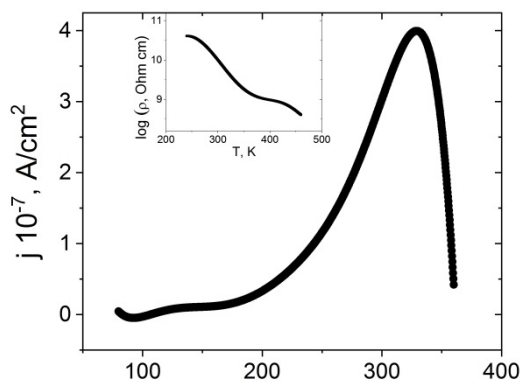


Рис.2 Температурная зависимость плотности тока образца Cu-Ga-Se ($\text{Cu}/\text{Ga}=0.15$). На вставке: температурная зависимость удельного сопротивления для этого образца

- [1] Abderrahmane Belghachi, Naima Liman, Chinese Journal of Physics **55**, 1127 (2017).
- [2] P. Jackson, D. Hariskos, R. Wuerz, O. Kiowski, A. Bauer, T. M. Friedlmeier, M. Powalla, pss (RRL) **9**, 28 (2015).
- [3] B. Mahmoudi, F. Caddeo, T. Lindenberg, T. Schneider, T. Hölscher, R. Scheer, W. Maijenburg, Electrochim. Acta **367**, 13718 (2021).

Спектры комбинационного рассеяния нитратно-йодатной системы

Алиев А.Р., Ахмедов И.Р., Какагасанов М.Г., Алиев З.А.,
Бекболатов А.М.

¹ *Институт физики им. Х. И. Амирханова ДФИЦ РАН, Россия, Махачкала
e-mail: amilraliev@mail.ru*

Спектроскопия является одним из основных методов современной экспериментальной физики. Спектроскопия комбинационного рассеяния света или рамановская спектроскопия дает обширную информацию о структурных и динамических свойствах исследуемых систем на молекулярном уровне [1 – 3]. Это связано с тем, что ширина рамановской спектральной полосы, соответствующей внутримолекулярному колебанию, зависит от скорости релаксации этого колебания [1], а скорость этой колебательной релаксации определяется взаимодействием возбужденной молекулы с окружением [2]. С увеличением скорости релаксации ширина колебательной полосы увеличивается и наоборот [3].

Целью данной работы является изучение релаксационных процессов в иодате лития LiIO_3 , в нитрате лития LiNO_3 и в нитратно-йодатной системе $\text{LiNO}_3 - \text{LiIO}_3$ методом рамановской спектроскопии.

В соответствии с целью в качестве объектов исследования выбраны кристаллические LiNO_3 и LiIO_3 , а также их бинарные системы с концентрациями компонентов $0.5\text{LiNO}_3-0.5\text{LiIO}_3$ и $0.6\text{LiNO}_3 - 0.4\text{LiIO}_3$.

Нитрат лития в спектрах КР имеет соответствующие колебания $\nu_1(\text{A}) \sim 1070 \text{ см}^{-1}$, $\nu_2(\text{E}) \sim 820 \text{ см}^{-1}$, $\nu_3(\text{E}_g) \sim 1384 \text{ см}^{-1}$, $\nu_3(\text{E}_g) \sim 735 \text{ см}^{-1}$ [5].

Йодат лития образует решетку гексагональной формы с параметрами ячейки $a = 0,5469 \text{ нм}$, $c = 0,5155 \text{ нм}$, $Z = 2$ [5 - 6]. При температуре 255°C происходит переход в фазу тетрагональной сингонии, параметры ячейки $a = 0,973 \text{ нм}$, $c = 0,615 \text{ нм}$ [5 - 6].

Йодат-ион IO_3^- с пространственной группой C_6^6 имеет только одно колебание активное в спектрах комбинационного рассеяния $\nu_1 (821.6 \text{ см}^{-1})$ [4]. Йодат лития имеет колебания, видимые в ИК и КР спектрах $\nu_1(\text{A}) \sim 763,8, 798,3, 816,3 \text{ см}^{-1}$, $\nu_2(\text{B}) \sim 783,1 \text{ см}^{-1}$, $\nu_3(\text{E}) \sim 766,5 \text{ см}^{-1}$ [6]. Температура плавления LiIO_3 равна 430°C (рис. 1 с).

При помощи дифференциально термического анализа (ДТА) была определена температура плавления индивидуальных компонентов и бинарных систем. Она примерно равна $232 - 235^\circ\text{C}$ (рис. 1). ДТА анализ не выявил никаких фазовых превращений у компонентов и у бинарных систем помимо плавления.

Были проведены измерения двух бинарных систем $0.5\text{LiNO}_3-0.5\text{LiIO}_3$ и $0.6\text{LiNO}_3 - 0.4\text{LiIO}_3$. В ходе измерения образцов мы получили спектры, показанные на рисунке 2.

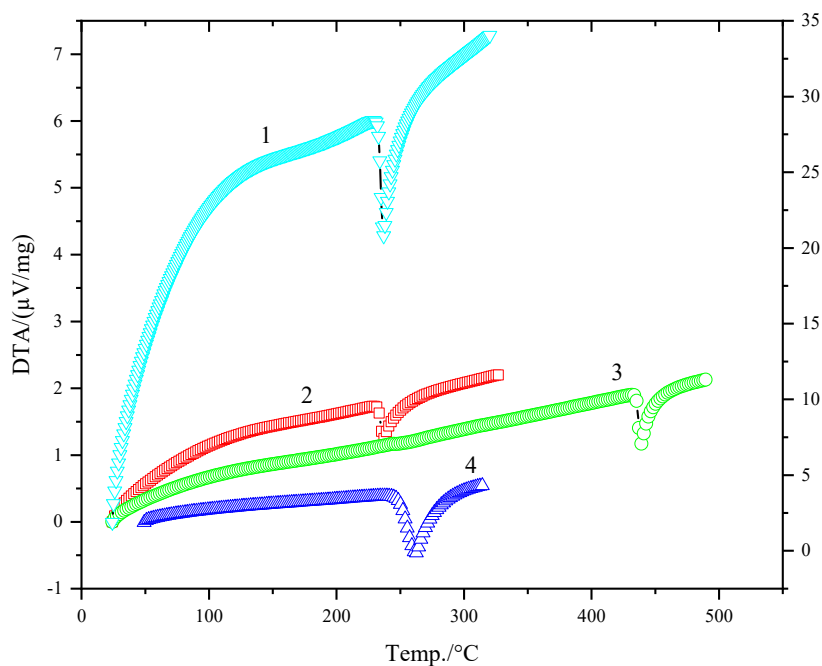


Рис. 1. ДТА-анализ компонентов и бинарной системы $\text{LiNO}_3 - \text{LiIO}_3$ $0.5\text{LiNO}_3 - 0.5\text{LiIO}_3$ (1), $0.6\text{LiNO}_3 - 0.4\text{LiIO}_3$ (2), LiIO_3 (3), LiNO_3 (4)

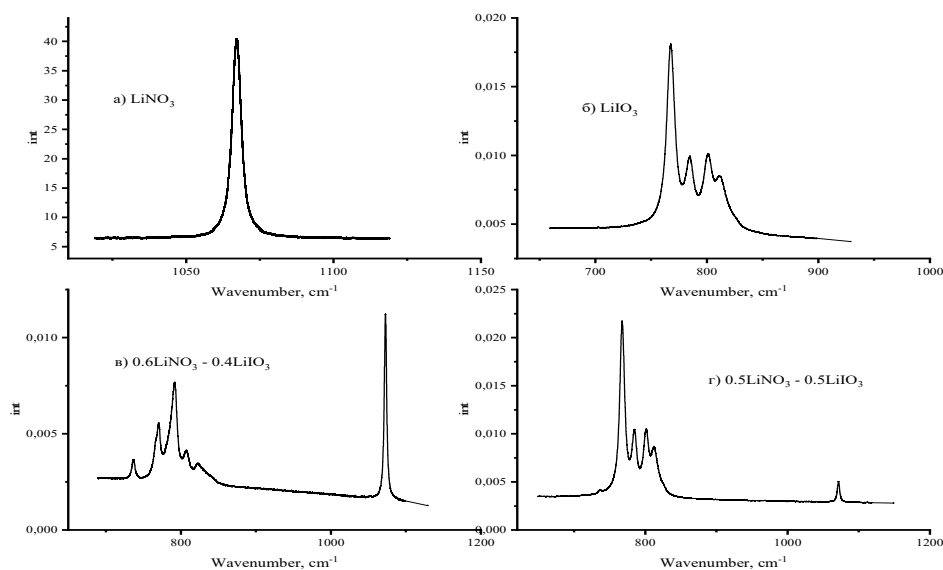


Рис. 2. Спектры чистых компонентов а) LiNO_3 при $T = 25^\circ\text{C}$, б) LiIO_3 при $T = 20^\circ\text{C}$ и бинарных систем в) $0.6\text{LiNO}_3 - 0.4\text{LiIO}_3$ при $T = 20^\circ\text{C}$, г) $0.5\text{LiNO}_3 - 0.5\text{LiIO}_3$ при $T = 50^\circ\text{C}$.

На рисунке 3 и 4 были представлены результаты анализа полученных температурных зависимостей ширин спектральных полос полностью симметричных колебаний $\nu_1(\text{IO}_3^-)$ (рис. 3) и $\nu_1(\text{NO}_3^-)$ (рис. 4).

У бинарных систем (рис. 3), в зависимости от концентрации меняется ширина спектральной полосы полностью симметричного колебания $\nu_1(\text{IO}_3^-)$. В образце $0.6\text{LiNO}_3 - 0.4\text{LiIO}_3$ ширина этой полосы выше, чем у чистого LiIO_3 и $0.5\text{LiNO}_3 - 0.5\text{LiIO}_3$ за счет деформационного колебания нитрат-иона ($\nu_4(\text{E}) = 735 \text{ cm}^{-1}$).

Из рисунка 3 видно, что ширина спектральной линии полносимметричного колебания йодат иона в образце $0.6\text{LiNO}_3 - 0.4\text{LiIO}_3$ заметно выше, чем в остальных образцах. В образце $0.5\text{LiNO}_3 - 0.5\text{LiIO}_3$ (рис. 3) мы этой разницы не видим. Полагаем это потому, что из-за концентрации LiIO_3 в данной системе влияние деформационного колебания нитрат-иона $\nu_4(\text{E})$ было настолько мало, что оно не смогло изменить кристаллическую структуру системы и ширина спектральной линии полносимметричного колебания $\nu_1(\text{IO}_3^-)$ осталось практически неизменной.

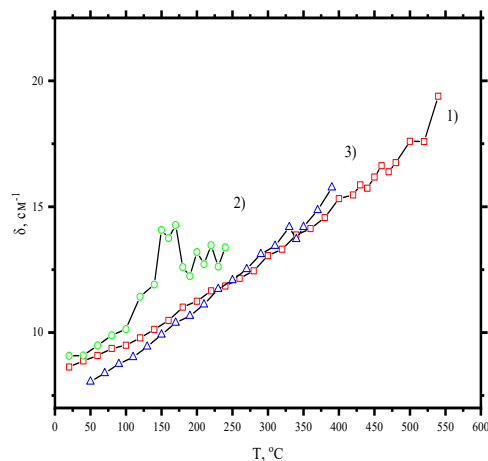


Рис.3. ширины спектральных линий соответствующим $\nu_1(\text{IO}_3^-)$ в чистом $\text{LiIO}_3(1)$, и в бинарных системах $0,6\text{LiNO}_3 - 0,4\text{LiIO}_3(2)$, $0,5\text{LiNO}_3 - 0,5\text{LiIO}_3(3)$

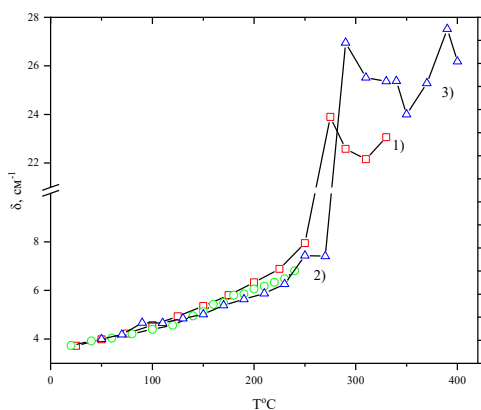


Рис.4. ширины спектральных линий соответствующим $\nu_1(\text{NO}_3^-)$ в чистом $\text{LiNO}_3(1)$, и в бинарных системах $0,6\text{LiNO}_3 - 0,4\text{LiIO}_3(2)$, $0,5\text{LiNO}_3 - 0,5\text{LiIO}_3(3)$.

Таким образом, установлено, что имеют место факторы, способствующие увеличению скорости релаксации внутримолекулярных колебательных мод в бинарных твёрдых системах по сравнению с индивидуальными кристаллами. По нашему мнению, объяснение данному экспериментальному факту можно найти, если допустить наличие дополнительного механизма релаксации колебательно-возбужденных состояний в бинарных твёрдых системах. Такой процесс возможен благодаря наличию двух колебаний ν_i и ν_j с близкими по

значению волновыми числами. При этом релаксация колебания ν_i может сопровождаться возбуждением ν_j , а разница их энергий передается решеточным колебаниям. Этот процесс можно представить в виде:

$$\nu_i > \nu_j, \quad \nu_i - \nu_j < \nu_m = \frac{k_B * T_D}{(h * c)} = 0.6938 * T_D (\text{см} * \text{K})^{-1} \quad (1)$$

Здесь k_B – постоянная Больцмана, T_D – температура Дебая в К, h – постоянная Планка, $c = 3 \cdot 10^{10}$ см/с, ν_m – максимальное волновое число для колебаний решётки в см^{-1} . Если $T_D = 200$ К, то $\nu_m = 139 \text{ см}^{-1}$. Обычно в кристаллах $T_D > 200$ К и $\nu_m > 139 \text{ см}^{-1}$.

Тогда ширину колебательной полосы бинарной твёрдой системы можно представить в виде:

$$\delta = \delta_{dep} + \delta_{dd} + \delta_{id} + \delta_{rep} + \delta_{res} + \delta_{imp} + \delta_{emp} + \delta_R \quad (2)$$

Здесь δ_{dep} – вклад в ширину спектральной линии за счёт колебательной дефазировки; δ_{dd} , δ_{id} , δ_{rep} – вклады за счёт диполь-дипольных, ион-дипольных, отталкивательных взаимодействий; δ_{res} – вклад за счёт резонансной передачи колебательных квантов; δ_{imp} – вклад за счёт процессов внутримолекулярного фононного распада колебательно-возбужденных состояний. В свою очередь слагаемое δ_{emp} – это вклад в ширину спектральной линии за счёт процессов релаксации колебательно-возбужденных состояний, связанных с неупругим межмолекулярным обменом колебательными квантами [1 - 3].

При реализации этого механизма возможен обмен колебательными квантами между различными молекулами или молекулярными ионами с близкими значениями частот внутримолекулярных колебаний. Такой неупругий межмолекулярный обмен должен сопровождаться «рождением» решёточного фона, который забирает разницу между энергиями релаксирующего и возбуждаемого колебаний. Поэтому предлагаемый механизм релаксации актуален, когда разность частот этих колебаний меньше, чем максимальная частота фононного спектра системы.

- [1] З.А.Алиев, М.Г.Какагасанов, А.Р.Алиев, И.Р.Ахмедов, А.И.Акаева. Спектры комбинационного рассеяния бинарных систем $\text{Li}_2\text{CO}_3 - \text{Li}_2\text{SO}_4$, $\text{Na}_2\text{CO}_3 - \text{Na}_2\text{SO}_4$, $\text{K}_2\text{CO}_3 - \text{K}_2\text{SO}_4$ // Вестник Дагестанского государственного университета. Серия 1: Естественные науки, 2018, т. 33, № 1, с. 28-36.
- [2] А.Р.Алиев, И.Р.Ахмедов, М.Г.Какагасанов, З.А.Алиев, М.М.Гафуров, А.М.Амиров. Молекулярная релаксация в твёрдых бинарных системах $\text{LiNO}_3 - \text{LiClO}_4$ и $\text{Li}_2\text{CO}_3 - \text{Li}_2\text{SO}_4$ // Известия высших учебных заведений. Физика, 2018, т. 61, № 2, с. 80-86.
- [3] А.Р.Алиев, И.Р.Ахмедов, М.Г.Какагасанов, З.А.Алиев, А.М.Амиров. Молекулярная релаксация бинарных систем $\text{LiNO}_3 - \text{LiClO}_4$, $\text{NaNO}_3 - \text{NaNO}_2$, $\text{K}_2\text{CO}_3 - \text{K}_2\text{SO}_4$ // Журнал структурной химии, 2018, т. 59, № 1, с. 85-91.
- [4] R.E.Miller, R.R.Getty, K.L.Treuil, G.E.Leroi. Raman spectrum of crystalline lithium nitrate // The Journal of Chemical Physics, 1969, V. 51, No 4, P. 1385-1389.
- [5] T.Unezawa, Y.Ninomiya, S.Tatuoka. Crystal growth and dimorphism of lithium iodate LiIO_3 // Journal of Applied Crystallography, 1970, Volume 3, Part 5, Page 417.
- [6] F.E.A.Melo, F.Cerdeira, V.Lemos. Raman scattering from three phases in LiIO_3 // Solid State Communications, 1982, V. 41, No 4, P. 281-287.

Гамма-резонансный анализ распределения оксидов железа в горных породах регионов России, Ближнего Востока и Европы

Гусейнов М.М.

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

Железо - один из наиболее распространенных элементов на планетах земной группы Солнечной системы и имеет исключительно важное значение для жизни на Земле. Это тяжелый элемент, который образуется в звездах в результате ядерного синтеза. В звездах массой меньше 8 солнечных масс, образование железа заканчивается на стадии заката звезды. Однако в более массивных звездах этот процесс продолжается, и результатом является слишком большой объем кислорода и железа, что приводит к катастрофическому коллапсу ядра звезды. Это ядро затем взрывается и железо распространяется по всей галактике. Гигантские взрывы в виде сверхновых звезд играют важную роль в формировании железа и других тяжелых элементов во Вселенной. Одна из основных гипотез происхождения земного железа основана именно на том, что железо попадает на Землю из космоса в составе метеоритов, астероидов, комет и космической пыли. Метеоритное железо довольно распространено в коре Земли, составляя приблизительно 5% массы коры. Теория метеоритного происхождения также объясняет неравномерное распределение железа на Земле. Так, на Северном полушарии гораздо больше железа, чем на Южном. Железо также является необходимым компонентом гемоглобина – белка, который отвечает за транспорт кислорода в крови. Железо существует по всему космосу и является одним из ключевых элементов при образовании планет. Горные породы Земли (магматические, метаморфические и осадочные). очень близки по составу с метеоритным веществом. В исследованиях геологов и астрофизиков все чаще находят подтверждение космического происхождения железа и многих других химических элементов планет Солнечной системы. По данным термомагнитных измерений частицы металлического железа и никеля обнаруживаются непосредственно в пылевых космических облаках, в атмосфере, во льдах, снеге, и осадках [1]. Исследования астрофизиков также показывают, что железо в составе метеоритов, астероидов и космической пыли на Солнце и его планеты из космоса [2, 3]. В состав космической пыли входят и микрометеориты – частицы, которые в силу их малой массы проходят через атмосферу и достигают поверхности Земли в неизменном виде, что делает проблему изучения горных пород важной для понимания происхождения Солнечной системы. Согласно космической гипотезе, фракции железа должны быть рассеяны по всей поверхности

планеты и обнаруживаться практически во всех горных породах, речных и морских отложениях, что подтверждается также данными термомагнитных измерений.

Наибольшее практическое значение имеют соединения Fe_2O_3 , Fe_3O_4 , FeO , FeOOH и $\text{FeOOH}\cdot n\text{H}_2\text{O}$). Гётит и гидрогётит чаще всего встречаются в корках выветривания, а также могут иметь осадочное происхождение, выпадая из коллоидных растворов в озёрах или прибрежных зонах морей.

Поэтому изучение горных пород, где в основном сосредоточены доступные человеку соединения железа представляет научную и практическую ценность, играет значительную роль в обогащении сведений о телах космического происхождения – планет Солнечной системы. Зная геологическое строение региона, можно определить какого типа ископаемые окажутся в его недрах. Такие разделы геологии, как петрология, вулканология, тектоника и сейсмология, позволяют прогнозировать землетрясения и извержения вулканов, определить места залегания природных ресурсов. Механизм образования горных пород может быть разным в зависимости от времени, места и климатических условий. Состав, строение и условия залегания горных пород находятся в причинной зависимости от формирующих их геологических процессов, происходящих внутри земной коры или на её поверхности. Естественно предположить, что если бы железо имело чисто земное происхождение, оно было бы сосредоточено в определённых регионах планеты, а не рассеяно по всей поверхности суши, морских и речных отложениях.

С целью подтверждения гипотезы о космическом происхождении железа, нами методом мёссбауэровской спектроскопии исследованы более 100 разных по морфологии, составу и структуре горные породы, морские и речные отложения, собранные с разных территорий планеты, в которых обнаружено железо в свободном виде (редко) и в составе разных минералов и разных физико-химических состояниях.

В данной работе проведен анализ распределения оксидов железа в образцах горных пород (без разграничения их на магматические, метаморфические и осадочные) с разных территорий России, Европы и Ближнего Востока. Образцы представляли собой измельчённый в агатовой ступе мелкодисперсный порошок горных пород. Измерения проведены на спектрометре МС-1104Ем, источником гамма-излучения служил $^{57}\text{Co}(\text{Cr})$. Расшифровка спектров проведена с помощью программы UnivemMS.

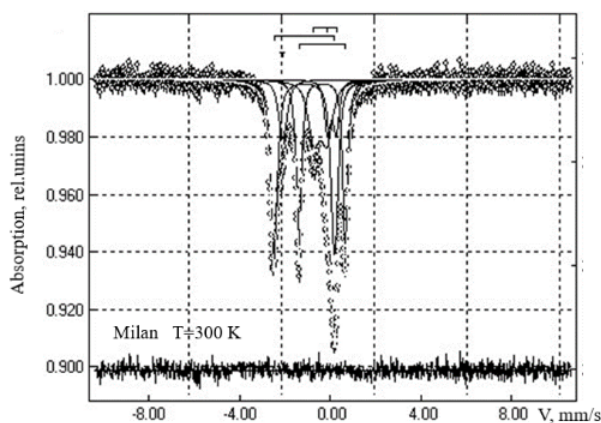


Рис.1. Модельная расшифровка спектра ядер ^{57}Fe в горной породе "Милан"

Таблица. Распределение оксидов железа по горным породам регионов.

Образцы горных пород	FeOOH· nH ₂ O, %	Fe ₂ O ₃ , %	Fe ₃ O ₄ , %	FeO, %	Fe, %
Россия					
Агвали-1 (Дагестан)	97.7±2.3	0.5±0.5	1.9±1.9		
Астрахань-1	71.8± 0.7		14.5±2.2		13.7±1.4
Ашагастал-1 (Дагестан)	89.0±11.0	11.0±1.0			
Красноярск-1	69.0±7.3		6.7±6.7	21.0±2.7	3.2±3.2
Москва	92.1±7.9	1.6±1.6	3.2±3.2	1.9±1.9	1.2±1.2
Санкт-Петербург		64.9±0.7	35.1±0.7		
Туапсе	83.3±16.7		16.7±16.7		
Ростов-на-Дону	94.6±5.4		11.0±11.0		
Красноярск	45.1±0.2		54.9±0.2		
Чечня	80.0±20.0		19.5±19.5		0.5±0.5
Турция					
г.Анталья-акдениз	90.4±9.6		9.6±9.6		
Стамбул-1	62.9±2.0	1.0±1.0	34.9±4.2		1.2± 1.2
Стамбул-2	47.5±11.0)		50.1±13.5		2.4±2.4
Саудовская Аравия					
С.Ар.Мина-1	95.3±4.7	1.7±1.7	3.0±3.0.		
С.Ар.Мина-2.	99.4±0.6	0.1±0.1	0.5±0.5.		
С.Аравия-1	94.5±5.0	2.1±2.1	3.4±3.4		
С.Аравия-2	22.4±22.4	1.0 ±1.0	76.0±24.0		0.6±0.6
С.Аравия-3	90.4±9.6		0.4±0.4	9.2±9.2.	
С.Ар-магнитная-1	35.6±4.8		64.4±4.8		
С.Ар. Хира -2	100.0±0.0.				
Муздалифа- 1	97.1±2.9	1.9 ±1.9	1.0±1.0		
Мекка-3	100.0±0.0				
Мекка-1	98.4±1.6	0.5± 0.5	1.1±1.1		
С.Ар. Хира -1	99.8±0.2			0.2±0.2	
Мекка-2	66.4±0.9	33.5±0.8	0.1±0.1		
Европа					
Хайденберг	6.7±6.7		3.3±3.3	1.3±1.3	2.1±2.1
Штудгарт1	89.1±10.9	3.3±3.3	5.2±5.2		2.4±2.4
Амстердам.Озеро Комо	34.1±3.8	1.0±1.0			4.5±4.5
Италия.Милан1	98.0±2.0	0.5±0.5	1.5±1.5		
Беларусь. Минск1	0.1±0.1		10.3±10.3		89.6±10.4
Косово. г.Шахты1	80.6±19.4	9.6±9.6	5.0±5.0	4.7±4.7	
Лиссабон. р. Сиго	41.4±17.8		58.6±17.8		
Швейцария. Аскона	96.1±3.9	3.9±3.9			

На рис.1. представлен результат модельной расшифровки спектра ядер ⁵⁷Fe в одном из горных пород Италии (Milan). Подобным же образом

расшифрованы и спектры ^{57}Fe в других породах, в которых, железо не только присутствует, но находится в составе разных минералов и в разных физико-химических состояниях. Наличие железа (в отличие от других химических элементов) во всех (за редким исключением) горных породах из многих территорий планеты, наряду с многими другими известными фактами, мы полагаем, является непосредственным подтверждением внеземного происхождения железа. Рассчитаны основные параметры спектров, выявлено наличие доступных для обработки программой UnivemMS оксидов железа в исследованных горных породах. В таблице приведены данные о распределении оксидов железа по горным породам регионов. Как видно из таблицы, исследованные горные породы наиболее объемно представлены оксидами – гнитом и гидрогетитом и магнетитом, редко встречаются вюстит и ещё реже - гематит и свободное железо.

По данным изомерных сдвигов окисление железа в оксидах соответствует всем его возможным валентным состояниям.

Литература

- [1] Д.М. Печерский, *Земля и Вселенная* **6**, 68–77 (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).

Спектральные зависимости коэффициента оптического поглощения пленок CuGaSe_2 полученных методом управляемой селенизации

Алиев М.А.¹, Гаджиев Т.М.¹, Алиев А.Р.¹, Крамынин С.П.¹,
Янарсаев А.В.², Асхабов А.М.¹

¹ Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: gadjiev_timur@mail.ru

² ГГНТУ им.акад. М. Д. Муллионщикова, Грозный, Россия

e-mail: aliyansars71@yandex.ru

Пленки CuGaSe_2 (CGS) со структурой халькопирита благодаря значения оптической ширины $E_g = 1,68$ эВ имеют большой потенциал для изготовления дешевых, гибких и легких tandemных устройств преобразования энергии для гражданского использования, а также в водородной энергетике и оптоэлектронике [1-2]. Стехиометрический и структурный контроль фазы CGS имеет решающее значение для улучшения оптических свойств пленок и оптимизации фотоэлектрической активности.

Тонкие пленки CGS получали на стеклянных подложках в экспериментальной термодиффузионной установке с участием газ-носителя (N_2) реакционной компоненты (Se). Температура в источнике селена была постоянной $T_{\text{ист.}} = 250$ °С, а температура в зоне селенизации варьировалась в пределах $200 \leq T_{\text{сел.}} \leq 550$ °С. Давление парогазовой смеси $\text{Se} + \text{N}_2$ для уменьшения реиспарения компонент пленки на этапе рекристаллизации увеличивали до 10^{-1} Па.

Все пленки характеризовались отсутствием микропроколов и хорошей адгезией к поверхности подложек. При низких температурах селенизации в пленках, полученных при температурах реакции $T_{\text{сел.}} \leq 350$ °С присутствуют малые очаговые микровключения, представляющие собой объемные области неправильной формы. С ростом температуры селенизации наблюдается тенденция увеличения диаметра основной массы включений и преобразования в вид квазисферической формы. Полученные результаты статистического анализа распределения поверхностной плотности микровключений по размерам в пленках позволяют утверждать, что распределение плотности поверхностных микровключений по размерам подчиняется логнормальному закону при $L > 0$:

$$f(L) = \frac{1}{L\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\ln^2(L/a)}{2\sigma^2}\right), \text{ где } f(L) \rightarrow \frac{n(L)}{S},$$

где a и σ (среднее квадратическое (стандартное) отклонение) – параметры логнормального распределения, $n(L)$ – число микровключений размером L , S – площадь пленки, $f(L) = 0$ при $L \rightarrow 0$.

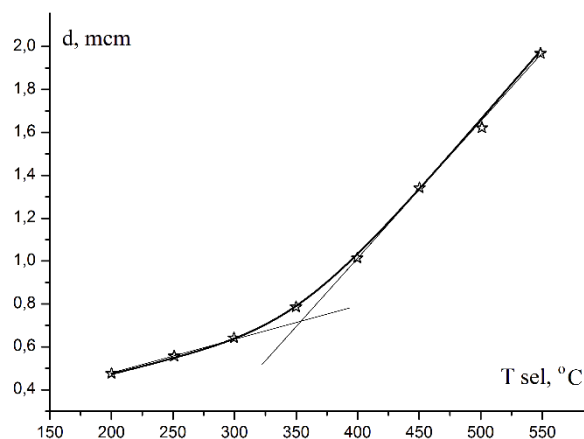


Рис. 1 – Температурная зависимость среднего размера микровключений в пленках CGS.

Зависимость среднего латерального размера микровключений от температуры не линейна. Из графика температурной зависимости среднего размера микровключений (рис. 1) в пленках CGS полученных экстраполяцией прямой на ось OX получили значение минимальной температуры селенизации $T_{сел.мин.} \approx 290$ °C при которой наблюдается образование микровключения, которая близка к температуре образования соединения Cu_2Se .

На дифрактограммах образцов CGS, полученных при температурах селенизации $T_{сел.}$ выше 350 °C, присутствует серия дифракционных линий 112, 204, 116 фазы халькопирита и наблюдается резкий рост интенсивности линии 112 и смещение линии 112 в область меньших значений 2θ . На дифрактограммах пленочных образцов CGS, полученных при температурах селенизации 200 ÷ 350 °C, присутствуют дополнительные дифракционные отражения 312 и 400 фазы халькопирита, а также отражения, связанные с соединениями Cu_2Se и $Cu_{0.25}Ga_{0.58}Se$.

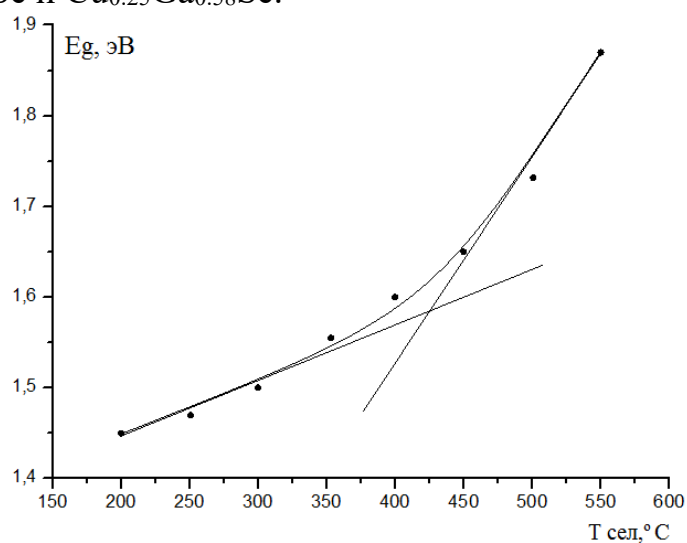


Рис. 2. – Оценка ширины запрещенной зоны пленок CGS, полученных при различных температурах селенизации.

Спектральные зависимости коэффициента поглощения для всех пленок являются типичными для халькогенидных пленок, с наличием широких максимумов в области $1,65 \leq h\nu \leq 1,95$ эВ. Экспоненциальный рост поглощения наблюдается вплоть до энергий $h\nu \approx 1,45$ эВ. С ростом температуры селенизации происходит смещение урбаховского края и максимумов поглощения в область больших энергий. Согласно работе [3] такие максимумы можно приписать образованию соединения CGS имеющего энергии переходов $E_g = 1,729 \div 1,813$ эВ.

Значения оптической ширины запрещенной зоны для пленок CGS, полученных при различных температурах селенизации находятся в области $1,45 \div 1,87$ эВ. С ростом температуры селенизации происходит нелинейное увеличение значений E_g , причем более резкий рост наблюдается для пленок, полученных при $450 \leq T_{\text{сел.}} \leq 550$ °С. Рост ширины запрещенной зоны связан с уменьшением количества и уменьшением энергий залегания собственных дефектов с ростом температуры селенизации.

Наличие в CGS вторичных бинарных фаз с высоким содержанием Cu или Ga приводят к искажениям кристаллической решетки и напрямую влияют на оптические свойства пленок. По данным фазовых диаграмм при температурах селенизации $T_{\text{сел.}} \leq 260$ °С в системе идет образование α -Cu₂Se и β -Cu₂Se [4]. В области температур $260 \leq T_{\text{сел.}} \leq 450$ °С наблюдается наличие фаз Ga₂Se₃ и CGS, причем при температурах селенизации $T_{\text{сел.}} \geq 500$ °С синтезируется однофазная CGS поликристаллическая пленка. Вероятно, точка перегиба $T_{\text{сел.}} \approx 350 \div 450$ °С на рис.1 и рис.2 связана с вовлечением Ga в процесс образования многокомпонентного CGS.

- [1] T. K. Todorov, D. M. Bishop, Y. S. Lee // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2018. – V. 180. – P.350.
- [2] A. D. DeAngelis, K. Horsley, N. Gaillard // J. Phys. Chem. C. – 2018. –V. 122. –P. 14304.
- [3] V. Mudryi, V. F. Gremenok, A. V. Karotki, V. B. Zalesski, M. V. Yakushev, F. Luckert, R. Martin // Journal of Applied Spectroscopy. –2010. – V. 77. – №. 3. – P. 371-377
- [4] J. C. Mikkelsen Ternary phase relations of the chalcopyrite compound CuGaSe₂. // Journal of Electronic Materials. –1981. –V. 10. –P. 541–558

К температурно-барическому поведению эффективной теплопроводности горных пород

Аливердиев А.А.^{1,2,6}, Григорьев Б.А.³, Алиев Р.М.^{1,4}, Заричняк Ю.П.⁵,
Бейбалаев В.Д.^{1,2}, Амирова А.А.⁶, Эфендиева М.Р.²

¹ ИИГВЭ – филиал ОИВТ РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия

³ ООО «Газпром ВНИИ ГАЗ», Развилка, Московская обл., Россия

⁴ Дагестанский Государственный Технический Университет, Махачкала, Россия

⁵ Национальный исследовательский Университет информационных технологий,
Механики и Оптики, Санкт-Петербург, Россия

⁶ Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: aliverdi@mail.ru

Как было показано в работах [1-6], температурная зависимость эффективной теплопроводности широкого класса материалов, включая горные породы, в достаточно широком температурно-барическом диапазоне хорошо описывается степенным законом:

$$\lambda(T, P) = \lambda(T_0, P) \cdot \left(\frac{T}{T_0} \right)^{n(P)} \quad (1)$$

где P – давление, T – температура, T_0 – произвольная фиксированная температура, которая может выбираться произвольно. Показатель степени n при этом варьируется в пределах от -1 , что соответствует кристаллической структуре с преимущественно волновым механизмом теплопереноса, до $+0.5$, что типично для аморфных сред.

Таким образом, для большинства горных пород с преимущественно кристаллической структурой с повышением температуры эффективная теплопроводность уменьшается. Вместе с тем повышение давления приводит к ее росту. В результате совместное влияние литостатического давления и геотермического градиента взаимно компенсируют друга, и как это отмечалось рядом авторов [7, 8], зачастую температурно-барической зависимостью данной величины в практических расчетах температурных полей можно пренебречь. В то же время для пород с преимущественно аморфной ориентации вместо компенсации происходит взаимная кумуляция и итоговое воздействие получается существенным (см. рис. 1).

Результаты комплексных исследований температурно-барических зависимостей эффективной теплопроводности гранитов и гранитоидов в температурном и барическом диапазонах $\sim 273-900$ К и $0.1-1500$ МПа также обсуждаются в докладе. [9-17] Перекрытие диапазонов различных экспериментальных методик делает возможным непосредственное сравнение результатов и обобщение выводов.

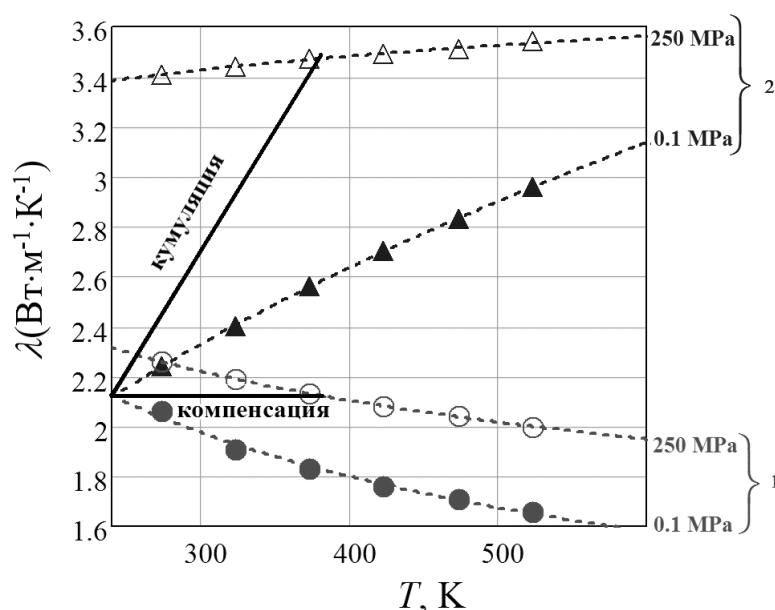


Рис.1 Температурная зависимость эффективной теплопроводности для песчаников кристаллической (образец 1, Дагестан, плотность $2.27 \cdot \text{г}/\text{см}^3$) и аморфной (образец 2, Тюмень (обр. Московского геологоразведочного института), плотность $2.29 \cdot \text{г}/\text{см}^3$) упорядоченности для двух давлений: атмосферного и 250 МПа. Специально подобраны образцы с близким абсолютным значением эффективной теплопроводности при низких температурах и давлениях и разной структурной упорядоченностью.

Обсуждаются температурные и барические диапазоны применимости предложенного описания, возможности его экстраполяции, взаимная корреляция входящих в него параметров, обратимые и необратимые модификации породы в результате фазовых переходов и частичного разрушения при температурном и барическом воздействии и др.

- [1] S.N. Emirov, A.A. Aliverdiev, Yu.P. Zarichnyak, R.M. Emirov, *Rock Mechanics and Rock Engineering* **54**, 3165-3174 (2021). DOI: 10.1007/s00603-020-02353-3
- [2] С.Н. Эмиров, А.А. Аливердиев, Р.М. Алиев, Э.Н. Рамазанова, Ю.П. Заричняк, Б.А. Григорьев, *Вести газовой науки*, **47** (2) 108-112 (2021).
- [3] С.Н. Эмиров, А.А. Аливердиев, В.Д. Бейбалаев, А.А. Амирова, Р.М. Алиев, И.А. Давудов, *Известия Российской академии наук. Серия физическая* **84** (9), 1338-1340 (2020). DOI: 10.31857/S0367676520090136
- [4] С.Н. Эмиров, А.А. Аливердиев, В.Д. Бейбалаев, Э.Н. Рамазанова, Р.М. Алиев, А.А. Амирова, *Известия РАН. Серия физическая*, **85** (9), 1272-1276 (2021). DOI: 10.31857/S036767652109009X
- [5] Р.М. Алиев, А.А. Аливердиев, Ю.П. Заричняк, Э.Н. Рамазанова, В.Д. Бейбалаев, *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, № 6, 23-28 (2022). DOI: 10.31857/S1028096022060048

- [6] Ю.П. Заричняк, А.А. Аливердиев, Б.А. Григорьев, Р.М. Алиев, А.А. Амирова, В.Д. Бейбалаев, Э.Н. Рамазанова, М.Р. Эфендиева, Вести газовой науки. **54** (2), 74-80 (2023).
- [7] B. Norden, A. Förster, H.-J. Förste, S. Fuchs, *Geothermal Energy*, **8**(1), 1-19 (2020). DOI: 10.1186/s40517-020-0157-0
- [8] J.D. Merriman, A.G. Whittington, A.M. Hofmeister, et al., *Precambrian Research*. **233**, 358-372. (2013). DOI: 10.1016/j.precamres.2013.05.009
- [9] M.A. Kant, J. Ammann, E. Rossi, C. Madonna, D. Höser and P. Rudolf von Rohr. Thermal properties of Central Aare granite for temperatures up to 500 C: Irreversible changes due to thermal crack formation // *Geophys. Res. Lett.*, **44**, 771-776 (2017). DOI: 10.1002/2016GL070990
- [10] K. Horai, J. Susaki, *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **55**, 292-305 (1989).
- [11] S.Q. Miao, H.P. Li, G. Chen, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, **115**, 1057-1064 (2014), DOI: 10.1007/s10973-013-3427-2
- [12] M.M. Miranda, C. R. Matos, N.V. Rodrigues, A.J.S.C. Pereira, J.J. Costa, *Journal of Iberian Geology*, **45**, 147-161 (2019). DOI: 10.1007/s41513-018-0096-9
- [13] L. Ray , R.K. Gupta, N. Chopra, D. Gopinadh, and S.K. Dwivedi, *Earth and Space Science*, **8** (2021). DOI: 10.1029/2021EA001645
- [14] Q. Sun, W. Zhang, Y. Zhu, Z. Huang, *Rock Mech. Rock Eng.*, **52**, 2691-2699 (2019). DOI: 10.1007/s00603-019-1733-0
- [15] X.G. Zhao, Z.G. Zhao, Z. Guo, M. Cai, X. Li, P.F. Li, L. Cheng, J. Wang, *Rock Mechanics and Rock Engineering*, **51**, 2055-2074 (2018). DOI: 10.1007/s00603-018-1479-0
- [16] S. Emirov, A. Aliverdiev, V. Beybalaev, A. Amirova, *Thermal Science*, **25** (4A) 2493-2501 (2021). DOI: 10.2298/TSCI200408176E
- [17] H. Fu, B. Zhang, J. Ge, Z. Xiong, S. Zhai, S. M. Shan, H. Li, *American Mineralogist*, **104** (11), 1533-1545 (2019). DOI: 10.2138/am-2019-7099

Линейная интерференция солитонов в многополевых моделях

Гаджимурадов Т.А.¹, Агаларов А.М.^{1,2}

¹ Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский Государственный Университет, Махачкала, Россия
e-mail: gta-1987@mail.ru

Среди разнообразия солитонов особо выделяются векторные, которые естественным образом возникают в многополевых системах [1]. Примечателен факт того, требование упругого взаимодействия может быть ослаблено для векторного класса солитонов [2]. Наиболее изучено поведение векторных солитонов в нелинейной волоконной оптике [3]. Даже в одномодовом волокне двулучепреломление приводит к необходимости рассмотрения двух ортогонально поляризованных компонент поля. Здесь основным препятствием к существованию устойчивых векторных солитонов является рассогласованность групповых скоростей для скалярных солитонов огибающих, что вызвано разницей постоянных распространения для линейно поляризованных мод. Существенную роль при описании вышеупомянутых векторных солитонов играет модель Манакова [4], которая представляет двух-компонентное обобщение нелинейного уравнения Шрёдингера (НУШ) [5].

Недавно в рамках фокусирующей модели Манакова найден новый тип векторных солитонов – «невырожденных» [6]. Стоит уточнить, что невырожденность характеризуется нетождественностью волновых чисел в векторном решении, т.е. применимо только к многополевым солитонам. В списке, предложенных есть «multispeed soliton» (mss), которые в каждой компоненте содержат солитоны с абсолютно произвольными характеристиками. Существование таких солитонов в истинно векторных моделях является нетривиальным результатом, хотя и численно предсказывалось ранее.

В данной же работе показывается, что в многополевых системах mss представляют линейную интерференцию вырожденных солитонов. Для

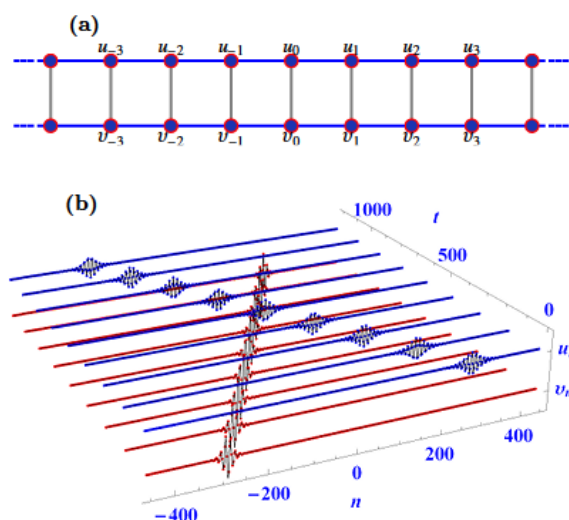


Рис.1 (а) Схематическое представление модели (б) результаты численного моделирования

этого сначала исследуется динамика солитоноподобных возмущений в системе связанных ангармонических цепочек [Рис.1(а)], задаваемой гамильтонианом

$$H = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2} (\dot{u}_n^2 + \dot{v}_n^2) + \frac{\alpha}{2} (u_n - u_{n+1})^2 + \frac{\alpha}{2} (v_n - v_{n+1})^2 + \frac{\beta}{4} (u_n^4 + v_n^4) + \frac{\gamma}{2} u_n^2 v_n^2 \quad (1)$$

Численный анализ показывает, что при $\gamma = 3\beta$ разнесенные начальные парциальные возмущения распространяются с постоянными и отличными друг от друга скоростями. Примечательно, что при достижении одной пространственной области (где член кросс-взаимодействия существенен) захват и каналирование одной солитонной компоненты другим не реализовывается, а также отсутствуют эффекты более низшего порядка. Т.е. не происходит рождения векторного солитона и возмущения эволюционируют как скалярные солитоны, однако присутствует малый фазовый сдвиг. Для описания, данного феномена, используя метод многих масштабов и преобразование Гарднера-Морикавы получены уравнения огибающих парциальных солитонов. Условие же $\gamma = 3\beta$ оказывается условием их интегрируемости. Окончательно с учетом этого и введя обозначение $\sigma = \gamma/2$ можно получить [7]

$$\begin{aligned} iU_\tau + U_{\xi\xi} + 2\sigma(|U|^2 + 2|V|^2)U + 2\sigma U^*V^2 &= 0, \\ iV_\tau + V_{\xi\xi} + 2\sigma(|V|^2 + 2|U|^2)V + 2\sigma V^*U^2 &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Поиск аналитических решений системы (2) являлось целью многих исследований, т.к. она эквивалентна модели распространения векторных солитонов в одномодовом волокне со слабым лучепреломлением при наличии когерентного и некогерентного взаимодействий. Для получения точных решений можно воспользоваться тем, что *линейное* преобразование

$$U = (\Psi^{(1)} + \Psi^{(2)})/2, \quad V = (\Psi^{(1)} - \Psi^{(2)})/2, \quad (3)$$

приводит к системе несвязанных НУШ

$$i\Psi_\tau^{(\nu)} + \Psi_{\xi\xi}^{(\nu)} + 2\sigma|\Psi^{(\nu)}|^2\Psi^{(\nu)} = 0, \quad \nu = 1, 2. \quad (4)$$

Преобразование (3) обуславливает интерференцию солитонов НУШ. Взяв в рассмотрение классическое двух-солитонное решение НУШ (при некоторых условиях на параметры) можно получить, что в $(U; V)$ векторном солитоне первая компонента первого векторного солитона и вторая компонента второго подвергаются конструктивной интерференции, а остальные деструктивной. Это приводит к генерации mss решения, которые отображены на Рис 2. Несложно видеть, что результаты численного моделирования хорошо согласуются с динамикой 1-mss решения.

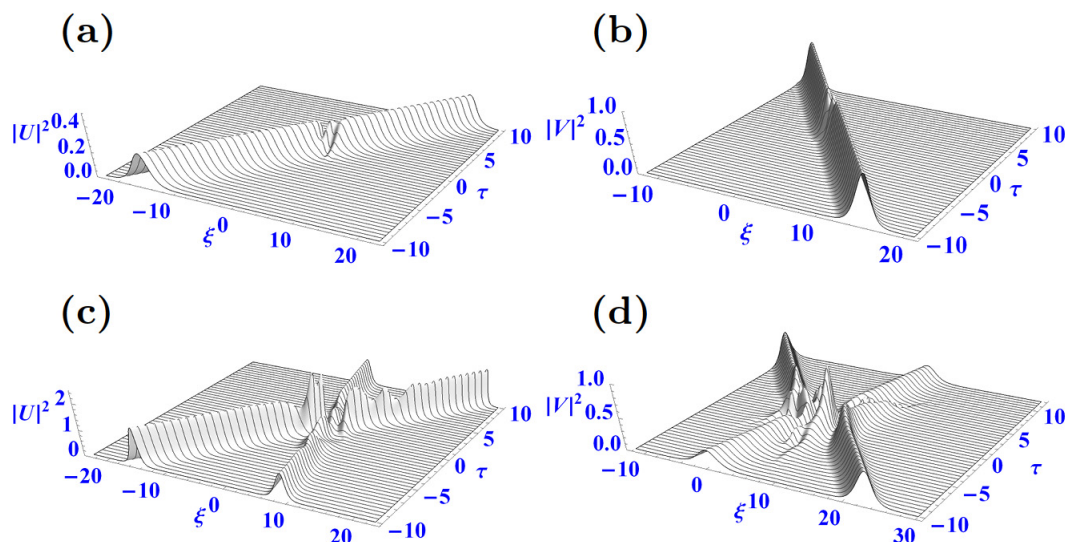


Рис.2 Одно-солитонное (a-b) и двух-солитонное (c-d) mss решения. Каждый парциальный солитон распространяется независимо от других.

Таким образом, в моделях (1) и (2) структура mss ясна и понятна – она представляет интерференцию солитонных решений. Однако такой механизм интерференции работает и в случае модели Манакова и даже в случае n -связанных НУШ солитонов. В этом случае, конечно, линейное преобразование аналогичное (3) не расщепляет систему на два независимых НУШ. Оно представляет отображение множества решений на само себя, т.е. линейная интерференция исходных состояний, также будет решением [7]. Например, в случае дефокусирующей модели n -связанных НУШ это позволяет строить темные солитоны с нетривиальным несущей фоновой волной [8].

- [1] В. Наянов, Многополевые солитоны, ФизМатЛит, Москва (2022).
- [2] А. М. Агаларов, Р.М. Магомедмирзаев, письма ЖЭТФ, **76**, 488 (2002).
- [3] Y. S. Kivshar and G. Agrawal, Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals, Academic press, San Diego (2003) .
- [4] С.В. Манаков, ЖЭТФ, **65**, 505 (1973).
- [5] В. Е., Захаров, А. Б. Шабат, ЖЭТФ **61**, 118 (1971).
- [6] S. Stalin, R. Ramakrishnan, M. Senthilvelan, M. Lakshmanan, Phys. Rev. Lett. **122**, 043901 (2019).
- [7] T. A. Gadzhimuradov, Chaos 33, 023101 (2023).
- [8] T. A. Gadzhimuradov, Eur. Phys. J. Plus **138**, 279 (2023).

In situ исследования влияния высокого давления на структуру и электрические свойства фуллерена C_{70}

Соколовский Д.Н.^{1,2}, Волкова Я.Ю.¹, Титова Е.А.¹, Бабушкин А.Н.¹

¹ *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

² *Уральский государственный медицинский университет Минздрава России, Екатеринбург, Россия*

e-mail: dmitry.sokolovsky@urfu.ru

Физические свойства фуллеренов, и материалов на их основе, демонстрируют широкие перспективы применения в электротехнике и оптоэлектронике. Представленная работа направлена на изучение особенностей формирования фаз высокого давления фуллерена C_{70} . Структурные исследования, такие как КР спектроскопия и рентгеновская дифракция, указывают только на локальную трансформацию фаз, и не дают исчерпывающей информации о давлениях фазовых переходов. В то же время, поведение проводимости или теплопроводности в точке фазового перехода может свидетельствовать о том, что переход происходит во всем объеме исследуемого вещества. Поэтому возникает необходимость совмещения исследований влияния высокого давления на структуру образца и его термоэлектрические характеристики. В настоящей работе представлены результаты *in situ* КР спектроскопии фуллерена C_{70} при давлениях до 30 ГПа, а также исследование влияния высокого давления на транспортные свойства фуллерена.

В работе был исследован порошкообразный фуллерен C_{70} чистотой не менее 99.5%. Образец был изготовлен в Институте металлоорганической химии РАН методом электродугового разряда. С помощью рентгеноструктурного анализа установлено, что исходный образец C_{70} имеет гранецентрированную кубическую решетку.

В исследованиях влияния высокого давления на структуру C_{70} для создания высоких давлений использовалась камера высокого давления Мерилла-Бассета. В исследованиях электрических свойств использовались камеры высокого давления типа “закругленный конус – плоскость” Верещагина-Яковлева с проводящими наковальнями, изготовленными из поликристаллических алмазов «карбонадо». Благодаря развитой объемной структуре металлической фазы кристалл «карбонадо» имеет хорошую электропроводность, что позволяет использовать наковальни в качестве контактов к исследуемому образцу и изучать электрические характеристики материалов под давлением [1].

Результаты КР спектроскопии свидетельствуют о сохранении структурных особенностей фуллерена C_{70} при давлениях порядка 20 ГПа. Однако, уже при 14 ГПа отчетливо наблюдается только широкий пик с

частотой около 1567 см^{-1} , что свидетельствует о процессах аморфизации фуллерена под давлением [2]. С помощью КР спектроскопии мы также наблюдали ориентационный фазовый переход из гранецентрированной кубической в ромбическую фазу [3] в диапазоне давлений 2–5 ГПа. Ориентационный переход и аморфизацию структуры при давлениях выше 14 ГПа можно хорошо видеть на графике барической зависимости ширины спектральной линии с частотой 1567 см^{-1} (см. рисунок 1).

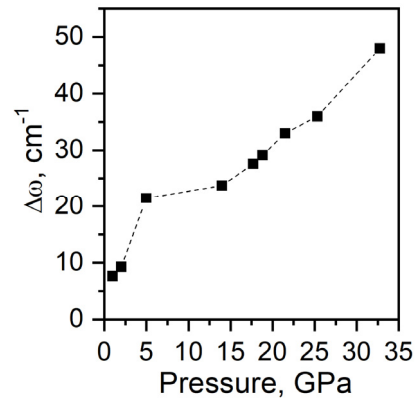


Рис. 1 Барическая зависимость ширины спектральной линии с частотой 1567 см^{-1} .

Согласно результатам электрических измерений аморфизация фуллерена C_{70} является частично обратимой при давлениях ниже 30 ГПа. Однако, при больших давлениях наблюдаются необратимые изменения как в спектрах комбинационного рассеяния, так и в барических зависимостях транспортных характеристик.

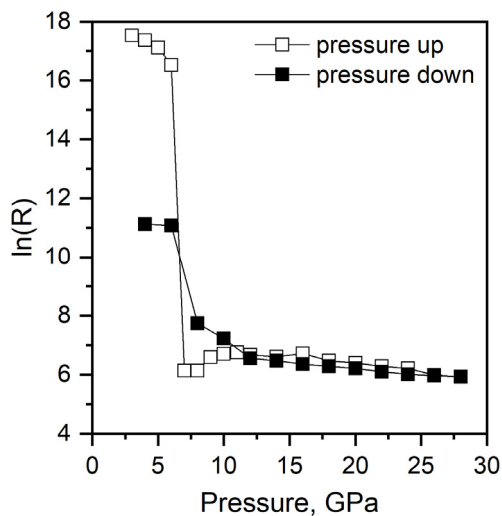


Рис. 2 Барическая зависимость электрического сопротивления фуллерена C_{70}

Данные зависимости также хорошо согласуются с приведенными выше результатами.

На рисунке 3 приведены барические зависимости коэффициента Зеебека в диапазоне до 46 ГПа. Тип носителей заряда не меняется во всем диапазоне давлений, но при давлениях более 30 ГПа наблюдаются значения термоЭДС близкие к нулю. В диапазоне давлений 18–32 ГПа наклон нагрузочной кривой значительно увеличивается, и можно отметить

На рисунке 2 представлена барическая зависимость электрического сопротивления в диапазоне давлений 0–30 ГПа. Падение электросопротивления при давлении порядка 6 ГПа также может быть обусловлено ориентационным переходом. При давлениях ниже 12–15 ГПа, сопротивление плавно убывает, что вероятно обусловлено аморфизацией структуры кристаллов фуллерена C_{70} [4].

В работе также были получены температурные зависимости электросопротивления при постоянных давлениях в диапазоне 20–50 ГПа.

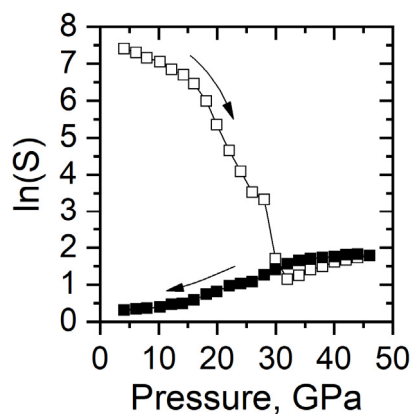


Рис. 3 Барические зависимости коэффициента Зеебека C_{70}

существенное падение коэффициента Зеебека. Вероятно, при больших давлениях фуллерен C_{70} необратимо переходит в графитоподобную фазу: при уменьшении давления наблюдается иной характер барической зависимости термоЭДС.

Таким образом, исследования показали, что образец фуллерена C_{70} проходит через ряд фазовых преобразований, обусловленных ориентационным переходом, процессами аморфизации, и необратимым разрушением структуры.

Преобразования структуры C_{70} , происходящие при давлениях порядка 50 ГПа, являются необратимыми.

- [1] E.N. Yakovlev et.al., Rev. Phys. Chem. Japan **50**, 243 (1980)
- [2] S. Wasa et al., Solid State Commun., **114**, 209 (2000).
- [3] Н. Kawamura, М. Kobayashi, Y. Akahama, Solid State Commun. **83**, 563 (1992)
- [4] Lukina I.N. et.al., IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. **848**, 012050 (2020)

Влияние высокого давления на электрическое сопротивление нанокompозита $\text{V}_2\text{Te}_3/\text{C}_{60}$

Соколовский Д.Н.^{1,2}, Волкова Я.Ю.¹, Хуснуллин В.Р.¹, Бабушкин А.Н.¹

¹ Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

² Уральский государственный медицинский университет Минздрава России, Екатеринбург, Россия

e-mail: dmitry.sokolovsky@urfu.ru

В работе представлено исследование влияния высокого давления на электрическое сопротивление нанокompозита $\text{V}_2\text{Te}_3/\text{C}_{60}$. Полученные в ходе экспериментов барические зависимости электросопротивления демонстрируют ряд особенностей, обусловленных фазовыми преобразованиями, происходящими в образце под действием высокого давления.

В объемных материалах транспортные характеристики сильно зависят от электронной структуры и микроструктуры материала, а их нанопрефрагментация позволяет модифицировать свойства материалов за счет размерных эффектов и рассеяния фононов на границах зерен [1]. Наличие молекул C_{60} в композите обеспечивает эффективное рассеяние фононов, уменьшающее теплопроводность решетки [2]. Известно, что при относительно невысоких давлениях в кристаллах фуллерена C_{60} происходят фазовые переходы, связанные с ориентационными преобразованиями. При давлениях более 20–25 ГПа наблюдаются переходы фуллерена в графитоподобные фазы [3]. Поэтому представляет интерес исследование влияния высокого давления на транспортные характеристики нанокompозита, содержащего C_{60} .

Исследованные в работе образцы получены в Технологическом институте сверхтвердых и новых углеродных материалов (ФГБНУ ТИСНУМ, г.Москва, Троицк). Исходный материал нанопорошок V_2Te_3 имел электропроводность n-типа. Концентрация C_{60} в смешанном порошке варьировалась в пределах 0–2%. Методика синтеза образцов подробно описана в работе [2].

Для создания высоких давлений использовалась камера высокого давления с двумя пуансонами (наковальнями) в виде закругленного конуса и плоского основания. Материалом для изготовления наковален служит синтетический поликристаллический алмаз «карбонадо». Структура такого синтетического алмаза представляет собой взаимопроникающие каркасы из алмазной и металлокерамической фаз. Благодаря развитой объемной структуре металлической фазы кристалл «карбонадо» имеет хорошую электропроводность, что позволяет использовать наковальни в качестве контактов к исследуемому образцу и изучать электрические характеристики материалов под давлением [4].

На рисунке 1 представлены барические зависимости электрического сопротивления нанокompозита $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{C}_{60}$. Сам образец представляет собой нанокристаллы Bi_2Te_3 (узкозонный полупроводник n-типа) покрытые слоем фуллерена C_{60} (широкозонный полупроводник n-типа). Можно отметить рост электросопротивления с повышением концентрации C_{60} . При увеличении давления электросопротивление немонотонно убывает в каждой из полученных зависимостей. Это объясняется фазовыми преобразованиями как самого Bi_2Te_3 , так и фуллерена C_{60} .

В образце исходного Bi_2Te_3 при увеличении и уменьшении давления барические зависимости электросопротивления имеют аналогичный характер. При добавлении C_{60} можно наблюдать особенность в виде точки перегиба в зависимости сопротивления около 20 ГПа. С увеличением содержания C_{60} данная особенность становится более выраженной, и, вероятно, обусловлена переходом фуллерена в графитоподобную фазу. Можно также отметить значительный гистерезис в зависимостях образцов, содержащих C_{60} .

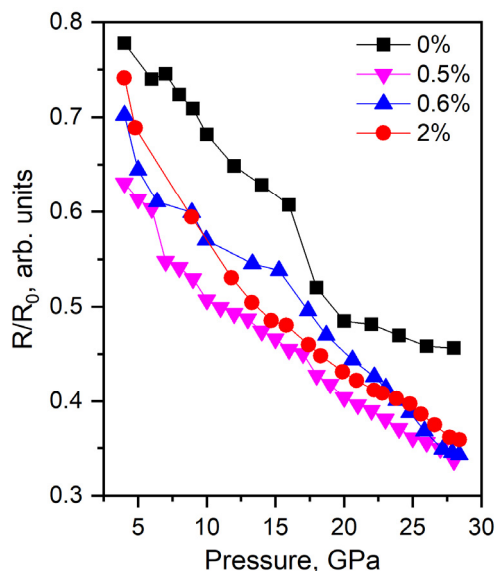


Рис. 2 Барические зависимости электрического сопротивления нанокompозита $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{C}_{60}$ с различным содержанием C_{60} , полученные при уменьшении давления от 28 ГПа.

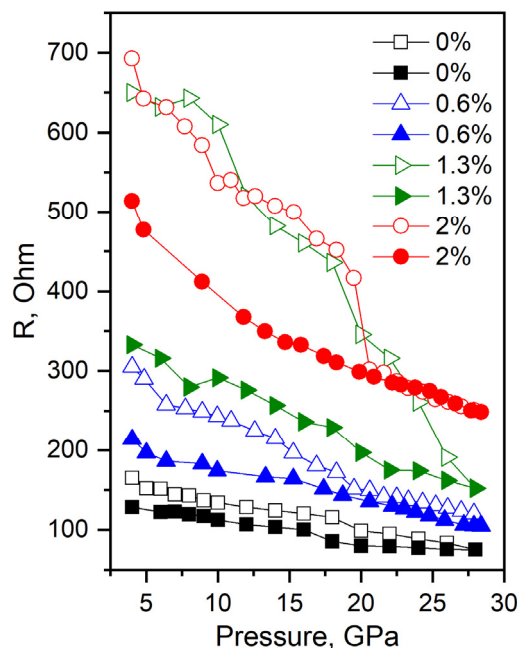


Рис. 1 Барические зависимости электрического сопротивления нанокompозита $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{C}_{60}$ с содержанием C_{60} в пределах 0–2%. Пустые символы соответствуют увеличению давления, а закрашенные снятию нагрузки.

графитоподобную фазу. Можно также отметить значительный гистерезис в зависимостях образцов, содержащих C_{60} .

На рисунке 2 представлены барические зависимости электрического сопротивления $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{C}_{60}$, полученные при уменьшении давления от максимального достигнутого в эксперименте 28 ГПа. Электрическое сопротивление приведено в относительных единицах. Можно отметить, что зависимости образцов, содержащих C_{60} , имеют аналогичный характер и слабо отличаются от барической зависимости исходного Bi_2Te_3 . Данное наблюдение также является подтверждением разрушения структуры фуллерена C_{60} . Однако, более точные выводы о вкладах в электро-

сопротивление образца Vi_2Te_3 и C_{60} позволит сделать импедансная спектроскопия при постоянных давлениях, которую мы планируем провести на следующем этапе исследования.

Таким образом, мы наблюдали ряд особенностей барических зависимостей электрического сопротивления нанокompозита $\text{Vi}_2\text{Te}_3/\text{C}_{60}$, обусловленных процессами фазовых преобразований, происходящих в образце под действием высокого давления. С увеличением содержания C_{60} электросопротивление образца возрастает. Барические зависимости полученные при уменьшении давления от 28 ГПа подобны зависимости исходного Vi_2Te_3 , что обусловлено разрушением структуры C_{60} при давлениях порядка 20 ГПа [3].

- [1] L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **47**, 16631 (1993)
- [2] M. Popov, S. Buga et.al., *Phys. Status Solidi A* **208**, 2783 (2011)
- [3] А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов, *УФН* **165**, 977 (1995)
- [4] E.N. Yakovlev et.al. *Rev. Phys. Chem. Japan* **50**, 243 (1980)

Развитие самосогласованной релаксационной теории коллективной динамики ионов в сильно неидеальной плазме

Файрушин И.И., Мокшин А.В.
Институт физики К(П)ФУ, Казань, Россия
e-mail: fairushin_ilmaz@mail.ru

Неидеальная плазма представляет собой электронейтральную систему заряженных частиц, энергия взаимодействия которых превышает энергию их теплового движения [1]. Свойства неидеальной плазмы во многом сходны со свойствами жидкого состояния вещества [2, 3]. Особенно ярко это проявляется при рассмотрении коллективной динамики частиц системы. Поэтому методы теории жидкости практически без изменения могут быть применены для описания термодинамических и транспортных свойств неидеальной плазмы. В данной работе развит теоретический формализм, описывающий коллективную динамику неидеальной однокомпонентной плазмы на основе самосогласованной релаксационной теории [3, 4]. Данный формализм опирается на корреляционные соотношения, связывающие частотные релаксационные параметры, которые характеризуют трех- и четырехчастичную динамику с параметрами, соотносящимися с двухчастичной динамикой. Расчет спектров динамического структурного фактора и дисперсионных характеристик на широком диапазоне волновых чисел обнаруживает их согласие с данными моделирования и результатами, полученными с использованием теории в рамках метода частотных моментов [5]. Предложенный формализм воспроизводит все особенности, присущие однокомпонентной плазме, и требует знания лишь параметров неидеальности и экранировки, а также соответствующей информации о структуре.

Авторы выражают признательность Фонду развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (проект № 20-1-2-38-1).

- [1] В.Е. Фортон, Г.Е. Морфилл (ред.). Комплексная и пылевая плазмы. Из лаборатории в космос, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2012).
- [2] J.-P. Hansen, I. R. McDonald, Theory of Simple Liquids, Academic Press, London, (2006).
- [3] A.V. Mokshin, I.I. Fairushin, I.M. Tkachenko, Phys. Rev. E **105**, 025204 (2022).
- [4] A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, J. Phys.: Condens. Matter **30**, 085102 (2018).
- [5] Yu.V. Arkhipov, A. Askaruly, A.E. Davletov, D.Yu. Dubovtsev, Z. Donko, P. Hartmann, I. Korolov, L. Conde and I.M. Tkachenko, Phys. Rev. Lett. **119**, 045001 (2017).

Структура и фазовые переходы в органических пленках на жидких подложках

Асадчиков В.Е.¹, Волков Ю.О.¹, Тихонов А.М.², Рощин Б.С.¹, Нуждин А.Д.

¹ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

e-mail: asad@crys.ras.ru

² Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, Москва, Россия

В работе представлены результаты исследований органических пленок нескольких типов на жидких подложках, приготовленных непосредственно на лабораторных и синхротронных рентгеновских установках, и проведенных методами рентгеновской рефлектометрии, рассеяния и дифракции в условиях скользящего падения, с последующим количественным анализом экспериментальных данных. В качестве подложек использовались такие жидкости как деионизованная вода и коллоидные растворы наночастиц диоксида кремния в воде (кремнезоли). Для кремнезольей показано присутствие на поверхности электрического двойного слоя, который обуславливает различия в особенностях организации полярных молекул при их нанесении на воду и кремнезоль [1]. Наиболее полно охарактеризованы макроскопически плоские слои дмиристоилфосфатидилсерина (DMPS). На водной подложке получены монослои различной плотности, соответствующей жидкой и гелевой фазам, для каждого определены площади, приходящиеся на одну молекулу фосфолипида. Эти результаты сопоставлены с молекулярно-динамическими расчетами и находятся в хорошем соответствии [2]. При нанесении раствора DMPS на кремнезольные подложки получены упорядоченные периодические мультислои сложного профиля плотности в направлении нормали к поверхности. Исследовано поведение мультислоя при нагревании выше температуры фазового перехода (35°C).

Помимо серии рефлектометрических измерений в процессе нагрева были также измерены кривые диффузного рассеяния, на которых зафиксировано исчезновение дифракционного пика, соответствующего жидкокристаллической фазе мультислоя. При этом, такое «расплавление» мультислоя, не полностью нарушает упорядочение в направлении по нормали к поверхности, что видно из восстановленных по рефлектометрическим данным профилей электронной плотности.

Также на кремнезольных подложках получены мультислои дистеароилфосфатидилхолина (DSPC). Восстановленные из данных рентгеновской рефлектометрии профили электронной плотности свидетельствуют о наличии в мультислое до девяти бислоев молекул фосфолипида. Кроме того, показано самоупорядочение структуры в интервале 5-7 дней, по окончании которого на профиле электронной плотности со стороны подложки проявляется 10-й бислой. При исследовании на синхротронной установке зафиксированы эффекты радиационного повреждения образцов при съемке участков кривых с низким коэффициентом отражения. Диаграммы рассеяния

рентгеновского излучения свидетельствуют о наследовании рельефа поверхностными слоями от слоев, находящихся вблизи жидкой подложки. Исследуемые структуры представляют интерес прежде всего как макроскопически плоские аналоги биологических мембран.

Следующим типом пленок, представляющих интерес в области энергетики, является сополимер фторопласта, носящий коммерческое наименование Нафион. Он известен механической прочностью и химической устойчивостью. В его молекулярной структуре присутствует главная перфторуглеродная цепь и гидрофильные боковых цепи с сульфоновыми группами, благодаря чему Нафион имеет специфические амфифильные свойства. Преимущественно его применяют для создания электролитических мембран топливных элементов. Ионная проводимость мембраны из Нафиона зависит от морфологии и локальной структуры пленки. При нанесении раствора Нафиона в метаноле на поверхность деионизованной воды наблюдался «разреженный» слой толщиной около 3.5 нм, плотность которого на 15–25% ниже, чем у подложки. Это значит, что практически весь нанесенный Нафион поглотился подложкой. Из литературы известно, что в водной среде Нафион формирует трубчатые мицеллы [3], при этом гидрофильные сульфогруппы боковых цепей мономеров ориентированы вдоль каналов проводимости. Это приводит к эффекту «разбухания» мицелл с накоплением в них воды и последующим разматыванием мономеров Нафиона из мембраны в окружающий водный объем [4]. При добавлении в водную подложку NaOH в концентрации 50 ммоль/л, слой Нафиона формирует стабильную пленку толщиной ≈ 2.7 нм. Интегральная плотность слоя Нафиона пропорциональна объему нанесенного на поверхность полимера. Предполагается, что абсорбция ионов Na^+ из объема субфазы в гидрофильную область мономера приводит к перестроению гидрофильно-гидрофобного баланса мицелл в сторону «гидрофобизации». Это обеспечивает понижение степени гидратации мембраны и формирование пленки с устойчивой структурой.

Представителем полимеров, применяющихся в медицине, является полилактогликолид (ПЛГ) — алифатический полиэфир, сополимер молочной и гликолевой кислот. Известен как биосовместимый полимер, разлагается при контакте с тканями живого организма, что позволяет создавать на его основе персонализированных тканеинженерные конструкции (ТИК), выполняющие роль трехмерного каркаса для заселения живой тканью [5]. Одним из подходов к изготовлению матриц для ТИК является метод анти-растворительной 3D-печати, основанный на формировании полиэфирного матрикса при фазовом разделении полимерного раствора в органическом растворителе в процессе экстракции растворителя в окружающую водную среду [6]. Микроструктура матрикса будет определяться кинетикой процессов фазового разделения и массопереноса, а макроструктура и форма заранее выбранной трехмерной моделью.

Образование полимерной фазы из растворов ПЛГ в хлороформе происходит при испарении растворителя в атмосферу без вовлечения в этот процесс водной фазы. При нанесении 20 мкл раствора ПЛГ формирует на поверхности пленку толщиной порядка 5 нм, в структуре которой присутствуют два выраженных подслоя одинаковой толщины (~2.5 нм) и плотности (~1.22 от плотности воды), что согласуется с толщиной сечения и объемной электронной плотностью алифатической цепи ПЛГ. Пленка, предположительно, сформирована двойным слоем молекул ПЛГ, ориентированных преимущественно вдоль плоскости поверхности, без проникновения фрагментов полимера в объем подложки.

Образование развитых полимерных структур в процессе фазового разделения растворов ПЛГ в тетрагликоле происходит с образованием на границе раздела с водой гель слоя. Раствор ПЛГ в тетрагликоле формирует на поверхности пленку толщиной 2-2.5 нм. При увеличении концентрации раствора ПЛГ до значений 7% пропорционально наблюдается увеличение плотности при сохранении толщины и структуры. Далее плотность слоя перераспределяется по толщине на глубину 5-10 нм, пленка переходит в нестабильное состояние, часть полимерных цепей «проваливается» в объем подложки. Данный эффект воспроизводится при указанных концентрациях независимо от метода приготовления и количества нанесенного раствора. Вблизи массовой концентрации 5% ПЛГ это может объясняться формированием вокруг гидрофобных макромолекул ПЛГ устойчивой сольватной оболочки из растворителя, которая обеспечивает транспорт гидрофобных макромолекул в воду. Пороговая концентрационная зависимость может быть связана с критическим соотношением взаимодействий макромолекула-растворитель, транспорт индивидуальной макромолекулы вместе с диффундирующим в воду ТГ становится маловероятен. Так же установлено, что при формировании твердой структуры дальнейший массообмен между раствором полимера и антирастворителем проходит через сплошной гидрофобный слой, толщиной до 2.5 нм, затрудняющий диффузию антирастворителя в раствор. При этом, согласно результатам в работе [6], эту диффузию полностью не исключаящий.

На примере органических пленок различных типов продемонстрированы возможности лабораторных и синхротронных установок для исследований органических структур с помощью рентгеновского излучения различной энергии и интенсивности. Полученные результаты имеют как фундаментальное, так и прикладное значение.

- [1] А.М.Тихонов, В.Е.Асадчиков, Ю.О.Волков, Б.С.Рошин, В.Хонкимаки, М.Бланко, Письма в ЖЭТФ **107**, 394 (2018).
- [2] Yu.A.Ermakov, V.E.Asadchikov, B.S.Roschin, Yu.O.Volkov, D.A.Khomich, A.M.Nesterenko, A.M.Tikhonov, Langmuir **35**, 12326 (2019).
- [3] T.Gierke, G.Munn, and F. Wilson, J. Polym. Sci., Polym. Phys. Ed. **19**, 1687 (1981).
- [4] K.B. Daly, J. V.Benziger, A.Z. Panagiotopoulos, P.G. Debenedetti, J. Phys. Chem. B. **118**, 8798 (2014).
- [5] A.Sensini, C.Gualandi, M.L.Focarete, J.Belcari, Biofabrication **11**, 035026 (2019).
- [6] A.V.Mironov, O.A.Mironova, M.A.Syachina, V.K.Popov, Polymer **182**, 121845 (2019).

Исследование вихревого движения в зазоре между плоскими дисками в сверхтекучем He-II

Селин П.Г., Левченко А.А.

Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН

e-mail: selin@issp.ac.ru

В последнее время во всём мире наблюдается всё больший интерес к проблемам турбулентности. В связи с развитием методов регистрации движения и анализа данных появилась возможность более точной регистрации турбулентности и обработки данных.

В качестве модельных объектов для исследования турбулентности используются вода, жидкий водород, жидкий гелий и другие жидкости. Особый интерес для исследования представляет сверхтекучий гелий, так как в нём возникают квантовые вихри при скоростях выше некоторой критической и изучение свойств которых способствует расширению существующих представлений о физике турбулентных явлений.

Разработана и изготовлена экспериментальная установка для изучения процессов вихревого движения в сверхтекучем гелии в узких зазорах. Установка позволяет проводить прямое наблюдение и видеосъемку процессов, происходящих в He-II при температурах ниже T_λ . Проведенные испытания продемонстрировали влияние скорости вращения дисков на перенормированное значение вязкости жидкости в зазоре между дисками.

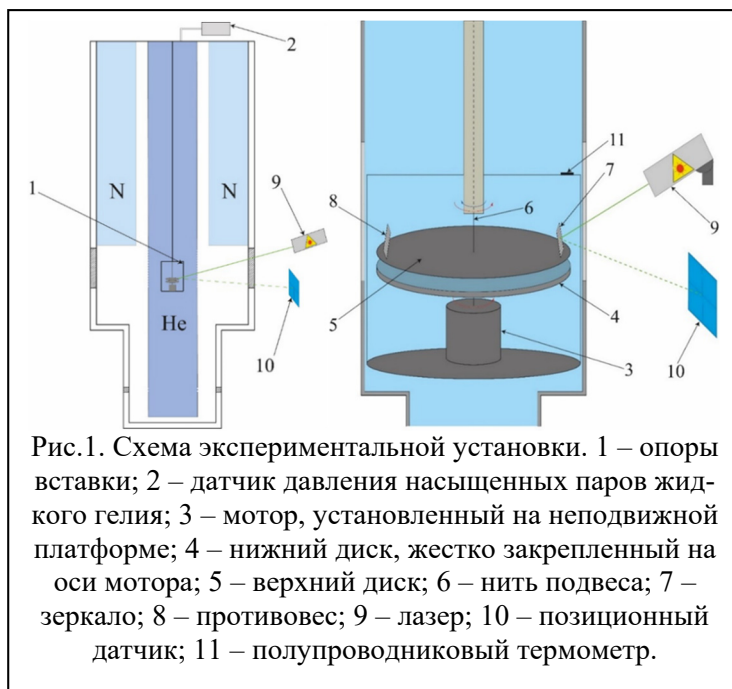


Рис.1. Схема экспериментальной установки. 1 – опоры вставки; 2 – датчик давления насыщенных паров жидкого гелия; 3 – мотор, установленный на неподвижной платформе; 4 – нижний диск, жестко закрепленный на оси мотора; 5 – верхний диск; 6 – нить подвеса; 7 – зеркало; 8 – противовес; 9 – лазер; 10 – позиционный датчик; 11 – полупроводниковый термометр.

Проведена серия предварительных экспериментов, которые подтвердили возможность регистрации угла отклонения, свободно подвешенного в He-II плоского диска от положения равновесия вследствие передачи углового момента силы, который возникает в жидкости при вращении с заданной скоростью расположенного под ним диска.

[1] Андроникашвили, Э.Л. // ЖЭТФ. 1946. т. 16. вып. 9. С. 780-785.

[2] Tabeling P, Zocchi, G., Belin, F., J. Maurer, J., Willaime, H. // Physical Review E. 1996. V.53. №2. PP. 1613-1621. PACS number(s): 47.27.—i, 47.55.Bx, 47.80.+v.

[3] Donnelly, R.J., Barenghi, C.F. // Journal of Physical and Chemical Reference Data. 1998. V. 27. №1217. PP. 1220-1274. <https://doi.org/10.1063/1.556028>.

Нелинейные волны уравнений Клейна-Гордона в модели с примесями

Фахретдинов М.И.¹, Екомасов Е.Г.¹, Самсонов К.Ю.², Кабанов Д.К.¹

¹ Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

e-mail: fmi106tf@gmail.com

² Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

Одним из популярных модельных уравнений, имеющим солитонные решения, и описывающим многие нелинейные волновые процессы в теоретической и математической физике, является нелинейное уравнение Клейна-Гордона (УКГ). Наиболее изученными примерами такого класса уравнений являются уравнения синус-Гордона (УСГ) и ϕ^4 [1,2].

Для использования УКГ в реальных физических приложениях, возникает необходимость его модифицировать. Например, путём

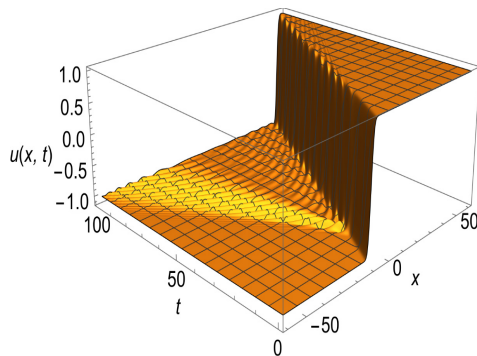


Рис.1 Динамика кинка ϕ^4 при прохождении примеси потенциального барьера.

добавления дополнительных слагаемых. Дополнительные слагаемые могут описывать внешнюю силу, диссипацию, неоднородность параметров среды и т.п. Одним из наиболее исследуемых случаев связан с введением неоднородности параметра, стоящего перед слагаемым, содержащим потенциал в УКГ. Модифицированное УКГ уже не имеет точных аналитических решений. Однако существует ряд широко применяемых аналитических методов, позволяющих

получить, хоть и приближённо, аналитическое решение задачи.

В данной работе для уравнения синус-Гордона и ϕ^4 в модели с одной или несколькими точечными и протяжёнными примесями была исследована возможная динамика кинков, получены различные типы локализованных на

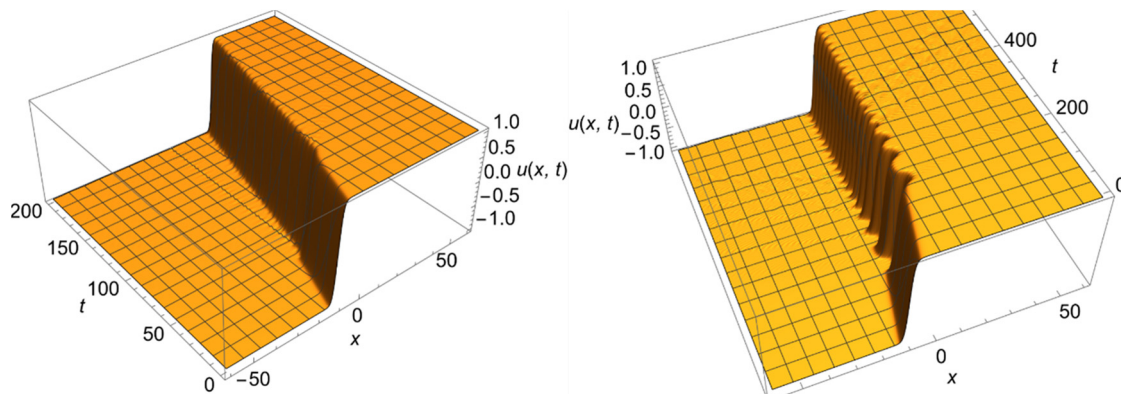


Рис.2 Динамика кинка ϕ^4 на примеси при а) прохождении кинка через потенциальную яму б) при пиннинге на потенциальной яме

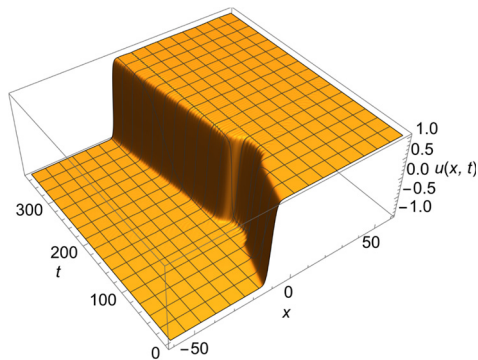


Рис.3 Динамика кинка ϕ^4 при резонансном отражении от примеси потенциальной ямы.

примесях волн. Для аналитических расчетов использовался метод коллективных переменных. Для численных расчетов были созданы программы с использованием явной схемы. В связи с особыми требованиями к точности проводимых расчетов, реализован и особый контроль погрешности результата. Найдено, что протяженная примесь качественно ведет себя как хорошо изученные точечные примеси, описываемые с помощью, дельта-функции.

Существенные количественные различия проявляются в особенностях динамики кинка при взаимодействии с примесью (см. рис. 1-3). Определены и описаны все возможные сценарии динамики кинка с учетом резонансных эффектов. Найдены зависимости критических и резонансных скоростей кинка в зависимости от параметров примеси. Показано, что эффект усиления «коллективного влияния» примесей, с увеличением их числа, будет приводить к появлению новых эффектов и сценариев динамики кинка.

- [1] J.Cuevas-Maraver, P.Kevrekidis, F.Williams, The Sine-Gordon Model and Its Applications: From Pendula and Josephson Junctions to Gravity and High-Energy Physics, Springer Cham (2014).
- [2] P.Kevrekidis, J.Cuevas-Maraver, A Dynamical Perspective on the ϕ^4 Model: Past, Present and Future (Nonlinear Systems and Complexity, 26), Berlin, Springer (2019).

Одномерная динамика доменной границы в мультислойной ферромагнитной структуре

Кабанов Д.К.¹, Самсонов К.Ю.², Назаров В.Н.³, Екомасов Е.Г.¹

¹ Уфимский университет науки и технологии Уфа, Россия

email: danya.kabanov.95@mail.ru

e-mail: EkomasovEG@gmail.com

² Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

³ Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального
исследовательского центра РАН, Уфа, Россия

Достижения в области нанотехнологий и методов измерения статичности и динамики намагниченности позволяют вернуться к ранним оптическим и магнитным исследованиям динамики доменных границ (ДГ) с новой точки зрения, и на новом экспериментальном уровне. Теперь можно экспериментально исследовать нанометровые движения отдельных ДГ и даже локализованные в нанобъеме магнитные неоднородности. Интересным объектом для таких исследований являются мультислойные магнитные структуры. Это связано со все более широкими возможностями их изготовления и практического применения. Часто, это периодически чередующиеся слои двух и более материалов, в том числе и наноразмерные слои, с разными физическими параметрами. Часто рассматриваются структуры со слоями имеющими различные значения магнитной анизотропии. Наиболее интересен случай, когда размер ДГ и размер, характеризующий неоднородность параметра анизотропии, одного и того же порядка. В этом случае форма ДГ должна претерпевать существенные изменения при прохождении через тонкий магнитный слой. В таких системах возможен пиннинг доменных границ, генерация локализованных волн намагниченности типа магнитных солитонов и бризеров, генерация спиновых волн.

В работе рассмотрена семислойная ферромагнитная структура, состоящая из четырех широких слоев, разделенных тремя тонкими (имеющими размер порядка ширины доменной границы) слоями, находящимися на расстоянии d друг от друга [1]. Широкие и тонкие магнитные слои отличаются друг от друга значениями константы магнитной анизотропии. Рассмотрен простой случай движения по инерции и отсутствия затухания. Показано появление как уже известных, так и новых сценариев динамики ДГ в мультислойном ферромагнетике с тремя тонкими (наноразмерными) и четырьмя широкими магнитными слоями по сравнению с ранее рассмотренными случаями одного и двух тонких магнитных слоев. Наблюдается большое различие в динамике доменной границы при наличии тонких магнитных слоев с увеличенным и уменьшенным значением константы магнитной анизотропии. Во втором случае, динамика ДГ сопровождается генерацией локализованных волн.

Взаимодействие с ними приводит, как и в случае одного и двух тонких слоев, к резонансным эффектам отражения ДГ от потенциальных ям и прохождения ДГ через них при начальной скорости менее критической. Найдены нелинейные зависимости этой критической скорости прохождения через области трех тонких слоев от их размеров, величины анизотропии. Для случая с увеличенным значением константы магнитной анизотропии в тонком слое конечная скорость ДГ практически совпадает с начальной, т. е. дополнительное увеличение числа слоев до трех не приводит к заметному ее изменению. Для случая с уменьшенным значением константы магнитной анизотропии эти скорости могут сильно различаться, причем, с увеличением числа слоев величина этой критической скорости возрастает. Предложена формула, содержащая константу зависящую от числа тонких слоев, связывающая конечную скорость ДГ с начальной, имеющей величину больше критической. Результаты исследований величин критических скоростей прохождения через мультислойные области можно использовать для нахождения эффективной коэрцитивной силы многослойных ферромагнитных материалов. Очевидно, что эффект усиления "коллективного влияния" тонких слоев, являющихся "потенциальными ямами" для доменной границы, с увеличением их числа будет и дальше приводить к появлению новых физических эффектов и сценариев динамики ДГ. Особый интерес представляет исследование случая периодических тонких магнитных слоев, уже рассмотренных ранее при изучении динамики спиновых волн.

[1] Д.К.Кабанов, К.Ю.Самсонов, В.Н.Назаров, Е.Г.Екомасов, ФТТ **65**, 558 (2023).

Поведение объема жидкой фазы на изохорах в бинарных смесях в окрестности критической точки жидкость-газ в рамках флуктуационной теории

Куликов В.Д.

Институт проблем нефти и газа РАН, Москва, Россия

e-mail: Kulikov@ipng.ru

Теоретическое описание поведения объема жидкой фазы в окрестности критической точки жидкость-газ смеси до сих пор представляет научный и практический интерес. Рассмотрим бинарную смесь с молярной концентрацией тяжелого компонента x . Предположим, что смесь имеет фазовую диаграмму I типа, т.е. линии критических точек по температуре, давлению и плотности $T_c(x)$, $P_c(x)$ и $\rho_c(x)$ непрерывны. В данной работе показано, что в рамках теории скейлинга и концепции изоморфизма критических явлений в смесях [1] могут быть получены аналитические выражения для относительного объема (доли) жидкой фазы $v_L = V_L/V$, (V_L и V есть объем жидкой фазы и объем всей системы) на различных термодинамических (т/д) путях, в частности, на изохорах.

Поведение v_L на другом термодинамическом пути (на изотерме) в рамках предлагаемого подхода было подробно исследовано в работе [2]. В этом случае выражение для v_L получается из условий сохранения полного числа молей смеси и числа молей второго компонента в области сосуществования жидкости «L» и газа «G»:

$$v_L = \frac{x\rho_G - \rho_{2G}}{\rho_{2L} - x(\rho_G - \rho_L)} \quad . \quad (1)$$

Здесь $\rho_{L,G}$ и $\rho_{2L,G}$ – молярные плотности жидкой и газовой фаз и молярные плотности второго компонента в этих фазах. В частности, было получено выражение производной по давлению $(\partial v_L / \partial P)_{T,x}$ и уравнение, определяющее положение максимумов v_L при движении по изотермам в области ретроградной конденсации смеси.

На изохоре в двухфазной области выражение для v_L получается из условия постоянства средней плотности смеси ρ :

$$v_L = (\rho - \rho_G) / (\rho_L - \rho_G) \quad . \quad (2)$$

Таким образом, для вычисления v_L необходимы выражения для $\rho_{L,G}$ и $\rho_{2L,G}$

В классическом подходе, использующем различные виды кубических уравнений состояния, выражения для плотностей фаз получают из решений кубического уравнения относительно плотности ρ , причем эти решения зависят от T , P , x . Концентрации второго компонента в жидкой и газовой фазах $x_{L,G}$ находятся из условий равенства химических потенциалов (χ/π)

компонентов в фазах. В итоге задача сводится к численному решению системы трансцендентных уравнений.

В нашем подходе давление $P(T, \mu_1, \mu)$ выбрано в качестве плотности т/д потенциала. Здесь $\mu = \mu_2 - \mu_1$ есть разность х/п компонентов. Далее т/д потенциал записывается в виде суммы универсальной сингулярной части $P_s(h_1, h_2) \propto |h_2|^{2-\alpha} f(z)$, зависящей от масштабно-инвариантного аргумента $z = h_1 / h_2^{\beta+\gamma}$ и неуниверсальной регулярной части $P_r(T, \mu_1, \mu)$, которую можно разложить в ряд в окрестности критической точки смеси. Универсальные критические индексы α , β и γ одинаковы для различных жидкостей и равны 0.11, 0.325 и 1.24. Два масштабных поля h_1 и h_2 есть линейные комбинации отклонений т/д величин от их значений в критической точке смеси, а h_{ij} - так называемые коэффициенты перемешивания т/д полей [3]:

$$h_1 = \frac{\Delta\mu_1(x)}{RT_c(x)} + h_{12} \frac{\Delta\mu(x)}{RT_c} + a\tau(x), \quad h_2 = \tau(x) + h_{21} \frac{\Delta\mu_1(x)}{RT_c(x)} + h_{22} \frac{\Delta\mu(x)}{RT_c}, \quad (3)$$

где $\Delta\mu_1 = \mu_1 - \mu_{1c}(x)$, $\Delta\mu = \mu - \mu_c(x)$ и $\tau(x) = T / T_c(x) - 1$. Важное замечание: в двухфазной области поле $h_1 = 0$, а $h_2 < 0$. В теорию необходимо ввести еще две величины, а именно, масштабные плотности $\varphi_1 = (\partial P_s / \partial h_1)_{h_2}$ и $\varphi_2 = (\partial P_s / \partial h_2)_{h_1}$. В двухфазной области они равны $\varphi_1 = \pm B_0(x) |h_2|^\beta$ и $\varphi_2 = -A_0(x) |h_2|^{1-\alpha} / (1-\alpha)$. Амплитуды B_0 и A_0 , напротив, неуниверсальные, их значения зависят от исследуемой системы. Наконец, величины $\rho_{L,G}$ и $\rho_{2L,G}$ равны $\rho = (\partial P / \partial \mu_1)_{T,\mu}$ и $\rho_2 = (\partial P / \partial \mu)_{T,\mu_1}$, тогда

$$\begin{aligned} \rho_{L,G} &= \rho_c(\varphi_1(h_2) + h_{12}\varphi_2(h_2)) + \rho_r(T, \mu_1, \mu) \\ \rho_{2L,G} &= \rho_c(h_{21}\varphi_1(h_2) + h_{22}\varphi_2(h_2)) + \rho_{2r}(T, \mu_1, \mu) \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $\rho_r(T, \mu_1, \mu)$ и $\rho_{2r}(T, \mu_1, \mu)$ - есть регулярные части плотностей ρ и ρ_2 .

В соответствии с концепцией изоморфизма критических явлений в смесях [1], критические параметры T_c , P_c и ρ_c считаются функциями химического потенциала μ , а не концентрации x . Тогда поле h_2 , определяющее степень близости к критической точке, есть $h_2 \approx T / T_c(\mu) - 1$. Подстановка плотностей ρ и ρ_2 в определение (2) после некоторых преобразований дает:

$$v_L(h_2, \tau(x)) \approx \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{|\varphi_1(h_2)|} \left(\Delta\rho(x) - h_{21}\varphi_2(h_2) - (\tau(x) + |h_2|) \frac{K_3}{K_2} + d_1(x) |h_2| \right) \right), \quad (5)$$

$$\Delta\rho(x) = \rho / \rho_c(x) - 1, \quad K_2 = \frac{1}{T_c(x)} \frac{dT_c}{dx}, \quad K_3 = \frac{1}{\rho_c(x)} \frac{d\rho_c}{dx}.$$

Коэффициент $d_1(x)$ в (5) есть параметр регулярной части плотности [2]. Уравнение изохоры в двухфазной области, которое связывает $\tau(x)$ и h_2 при $\Delta\rho(x) = const$, можно получить из условий постоянства среднего состава

смеси $\rho x = \rho_{2L}v_L + \rho_{2G}(1-v_L)$. После подстановки (1) и (4) в это равенство и удержании наиболее существенных членов, имеем:

$$\tau(x) \approx X_F \varphi_2(h_2) + h_2 - K_1(x)K_2(x) \Delta\rho(x), \quad X_F = x(1-x)K_2^2. \quad (6)$$

Здесь $K_1(x) \propto x(1-x)$ - есть, так называемый, параметр Кричевского, физический смысл которого объясняется, например, в [4]. Подстановка $\tau(x)$ в выражение (5) дает:

$$v_L(h_2) \approx \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{|\varphi_1(h_2)|} \left(\Delta\rho(x) - \left(X_F \frac{K_3}{K_2} + h_{21} \right) \varphi_2(h_2) + d_1(x) |h_2| \right) \right). \quad (7)$$

В результате получили систему из двух параметрических уравнений (6) и (7), которая определяет $v_L(\tau(x))$ при заданном значении $\Delta\rho(x)$, а h_2 играет роль параметрической переменной. Из выражения (6) следует, что явную температурную зависимость для доли жидкой фазы можно установить для двух предельных случаев:

$$\begin{aligned} |h_2| &\approx \left(-\frac{1}{X_A} (\tau(x) + K_1 K_2 \Delta\rho(x)) \right)^{1/(1-\alpha)}, \quad X_A |h_2|^{-\alpha} \gg 1 \\ |h_2| &\approx -(\tau(x) + K_1 K_2 \Delta\rho(x)), \quad X_A |h_2|^{-\alpha} \ll 1, \end{aligned} \quad (8)$$

При одновременном выполнении условия $\tau(x) \leq -K_1 K_2 \Delta\rho(x)$ (введенный параметр $X_A = A_0 X_F$). Однако, на практике часто оказывается, что при очень малых концентрациях смеси ($x > 0.1$) в экспериментально достижимой области первые два слагаемых в правой части (6) имеют один порядок малости, поэтому режимы (8) наблюдаться не будут.

На Рис.1 показаны зависимости для доли $v_L(\tau(x))$, построенные с помощью (6), (7) для модельной смеси $C_1 + 0.25C_2$ на шести изохорах. Модельная смесь метан-этан достаточно хорошо изучена, значения параметров, необходимые для построения этих графиков известны. Из рисунка следует, что чем ближе изохора находится к критической изохоре $\Delta\rho(x) = 0$ (кривая (4) на рисунке), тем более резкими становятся зависимости $v_L(\tau(x))$. Как видно из рисунка, при плотностях $\rho < \rho_c(x)$, у $v_L(\tau)$ при некоторых значениях температур $\tau^*(x)$ имеются максимумы v_L^{\max} , величины которых не превышают 1/2. Очевидно, что

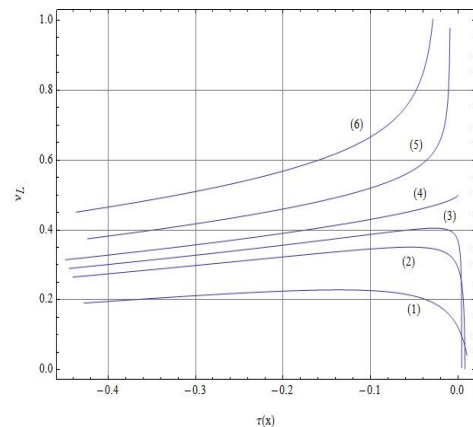


Рис.1 Зависимости $v_L(\tau)$ на разных изохорах $\Delta\rho(x)$:
(1) - 0.25; (2) - 0.1; (3) - 0.05;
(4) 0.0; (5) 0.1; (6) 0.25.

положение максимумов дается условием $(\partial v_L / \partial T)_{\rho, x} = (\partial v_L / \partial h_2)(\partial h_2 / \partial T)_{\Delta\rho(x)} = 0$.

Производная $(\partial h_2 / \partial T)_{\Delta\rho(x)}$ находится дифференцированием соотношения (6) по температуре и в ноль не обращается. Тогда условие на максимум есть просто $(\partial v_L / \partial h_2)_{\Delta\rho} = 0$, которое в несколько упрощенной форме имеет вид:

$$\Delta\rho(x) - \frac{(1-\alpha-\beta)}{\beta(1-\alpha)} \frac{K_3}{K_2} X_A |h_2|^{1-\alpha} - \frac{1}{\beta} (1-\beta) d_1 |h_2| = 0 \quad (8)$$

Численное решение этого уравнения дает величину $|h_2^*|$, соответствующую максимуму v_L , а подстановка $|h_2^*|$ в выражение (6) даст необходимую $\tau^*(x)$. У этого уравнения есть два предельных случая: $X_A |h_2|^{-\alpha} \gg d_1 K_2 / K_3$ и, соответственно, противоположный. Интересно отметить, что оба этих случая приводят к величинам $\tau^*(x) \sim \Delta\rho(x)$.

В заключение необходимо отметить, что данная достаточно простая модель не претендует на описание свойств смеси в широкой области физических параметров, ограничиваясь окрестностью критической точки жидкость-газ. В представленном виде она является скорее качественной и служит для иллюстрации особенностей термодинамического поведения околокритических смесей.

- [1] М.А.Анисимов, А.В.Воронель, Е.Е.Городецкий, ЖЭТФ **63**, 1117 (1972).
- [2] В.Д.Куликов, Актуальные проблемы нефти и газа **1(36)**, 7(2022).
- [3] А.З.Паташинский, В.А.Покровский, Флуктуационная теория фазовых переходов, Наука, Москва (1982).
- [4] Е.Е. Городецкий, В.Д. Куликов, Л.В. Федюнина, ЖЭТФ **111**, 120(1997).

Морфология роста кристаллов II и III модификаций при превращении II \leftrightarrow III в $K_{0.940}Cs_{0.060}NO_3$

Байрамлы Р.Б.¹, Насиров В.И.², Наджафов Г.Н.¹, Насиров Э.В.³

¹Бакинский Инженерный Университет, Баку, Азербайджан

²Азербайджанский Государственный Педагогический Университет,
Баку, Азербайджан

³Азербайджанский Военный Институт имени Г. Алиева, Баку, Азербайджан
E-mail: bayramov.razim@mail.ru

Изучение закономерностей полиморфного превращения в нитратовых соединениях щелочных металлов имеет не только научный, но и практический интерес, так как этот процесс связан с вопросами технологии получения монокристаллов смешанного состава, обладающих полиморфизмом.

Известно, что нитрат калия при комнатной температуре имеет структуру, подобную арагониту (II-модификация) с симметрией $Pmcn$ [1]. При нагревании II-модификации при $T > 403$ К превращается в структуру, очень близкую к кальциту (III-модификация) с симметрией $R3m$ [2]. Превращение II \rightarrow III относится к числу энантиотропных. Однако, при охлаждении иногда наблюдаются и два монотропных превращения. При охлаждении вблизи ~ 397 К III-модификация может перейти в новую структуру (I-модификация) с симметрией $R\bar{3}m$ [3] и лишь затем при ~ 383 К I-модификация превращается в II-модификацию.

Нитрат цезия при комнатной температуре кристаллизуется в ромбической псевдотригональной сингонии с симметрией $R\bar{3}m$ (II-модификация) [4]. При температуре ~ 434 К эта модификация превращается в кубическую (I-модификация) модификацию с симметрией $Pa\bar{3}$ [5]. Превращения II \leftrightarrow I в нитрате цезия также относятся к числу энантиотропных.

Установлению механизма полиморфных превращений в монокристаллах нитратовых соединений щелочных металлов, в том числе в нитратах калия и цезия, посвящены многочисленные исследования [6]. Исследованием морфологии и кинетики полиморфных превращений в нитрате цезия между I и II модификациями обнаружена новая х-модификация, кристаллическая структура которой не определена [7]. Определена фазовая диаграмма смеси нитратов калия и серебра [8], установлены фазовые переходы в $K_{1-x}Ag_xNO_3$ [9], изучены фазовые переходы в $K_{1-x}Rb_xNO_3$ методом спектроскопии комбинационного рассеяния света [10]. Молекулярно-динамическим моделированием исследованы структурные превращения в нитратах рубидия и цезия [11]. Методом ДСК составлена фазовая диаграмма системы $RbNO_3$ - $CsNO_3$ [12].

Исследуя твердые растворы CsNO_3 в RbNO_3 было установлено исчезновение I и II модификаций в полученном соединении при ~25 моль% CsNO_3 [13].

Целью данной работы является исследование влияния частичного замещения ионов K^+ ионами Cs^+ и повторного превращения на характер полиморфного превращения в нитрате калия. Для этого нами получены монокристаллы $\text{K}_{0.940}\text{Cs}_{0.060}\text{NO}_3$ и проведены микроскопические и рентгенографические исследования [14].

Кристаллы $\text{K}_{0.940}\text{Cs}_{0.060}\text{NO}_3$ были получены из водного раствора при комнатной температуре методом изотермической кристаллизации. Для совершенства и чистоты полученных монокристаллов нитрат калия ЧДА и нитрат цезия марки ХЧ подвергались дополнительной очистке путем многократной кристаллизации. Хорошо огранённые кристаллы размером в среднем $1 \times 0.5 \times 10$ мм имели разнообразные внешние формы.

Полученные кристаллы в основном имели формы игл, вытянутые по кристаллографическому направлению [001]. Морфологические исследования проведены при помощи оптического поляризационного микроскопа марки МИН-8, обеспеченного специальным нагревателем. Наблюдения за ростом кристаллов при полиморфных превращениях проводились при помощи кинокамеры типа «Levenhuk С310 НК» и зафиксированы компьютером. Температура кристалла измерялась термопарой, кончик которой непосредственно касался поверхности образца. Точность измерения температуры при 100°C достигала $\pm 1^\circ$.

Наблюдения в оптическом поляризационном микроскопе показывают, что при $T_{\text{пр}} > 457 \text{ K}$ в исследуемом кристалле происходит II \rightarrow III превращения. Сравнивая лауэграммы, снятые при комнатной температуре (рис 1, а) и при температуре $T = 460 \text{ K}$ можно убедиться, что в данном случае мы имеем структурные превращения типа монокристалл \rightarrow монокристалл.

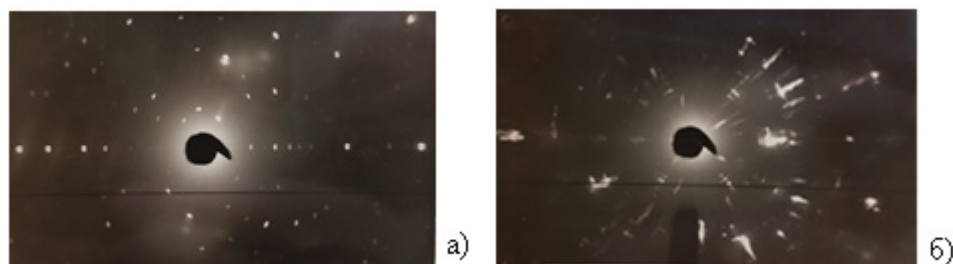


Рис.1. Лауэграммы II и III модификаций кристалла $\text{K}_{0.940}\text{Cs}_{0.060}\text{NO}_3$ до (а) и после (б) превращений II \rightarrow III.

Прежде всего нами была установлена температура равновесия III и II фаз, которая равна $T_0 = 457 \pm 1 \text{ K}$. Эксперименты показывают, что превращения II \rightarrow III всегда происходят при температуре $T_{\text{пр}} > T_0$ ($T_{\text{пр}}$ – температура превращения, T_0 – температура равновесия). Разность температур $\Delta T = T_{\text{пр}} -$

T_0 , как было установлено в наших прежних исследованиях, зависит от совершенства кристалла [15]. Максимальное отклонение температуры превращения от температуры равновесия между II и III модификациями составляет $\Delta T = 2^\circ$.

При температуре $T_{пр} > 457$ К зародыш III – модификации очень быстро растет по направлению [100]. Когда рост этого зародыша по направлению [100] прекращается, т. е. достигает другой границы II – кристалла, начинается медленней рост по направлению [001] (рис. 2, б). Как видно процесс превращения II → III в исследуемом кристалле происходит с образованием и ростом трех зародышей III – модификации кристалла (рис. 2, (с) зародыши указаны стрелками). Один зародыш образовался в середине кристалла, а другие два на разных концах кристалла.

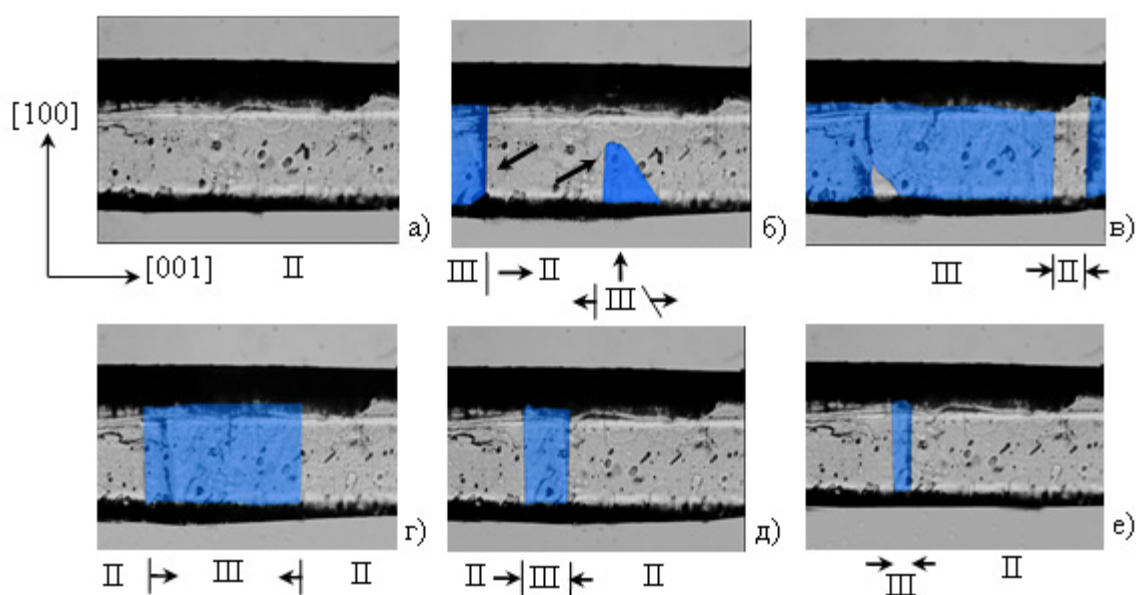


Рис.2. Оптическая микрофотография образования и роста III и II кристаллов при превращениях $II \leftrightarrow III$ (увеличение $\times 90$ раз) внутри матричного кристалла. а – матричный кристалл, б – образование и рост двух зародышей III - модификации внутри II – кристалла, в – продолжена роста III – кристалла в направлении [001], г – образование зародышей кристалла II – модификации внутри III – кристалла, д, е – продолжение встречного роста кристалла II – модификации внутри кристалла III – модификации.

При температуре $T < 457$ К в исследуемом кристалле происходит III → II превращение. Оно также происходит с образованием и ростом зародыша II модификации внутри кристалла III – модификации. На рис. 2 г–е иллюстрирован процесс превращения III → II с двумя зародышами. Происходит встречный рост двух зародышей в направлении [001] матричного кристалла. Оба зародыша имеют прямолинейную границу.

Таким образом, экспериментально установлено, что в кристаллах $K_{0.940}Cs_{0.060}NO_3$ полиморфные превращения носят энантиотропный характер, а рост кристаллов III и II модификаций при превращениях $II \leftrightarrow III$ происходят с образованием и ростом зародышей дочерней модификации внутри матричного. Также установлено, что промежуточная модификация между III и II модификациями отсутствует. Ритмический рост обнаруженный нами в кристаллах KNO_3 при $II \rightarrow III$ превращении [15] в данном случае не обнаруживается. Частичное замещение ионов калия ионами цезия способствует увеличению температуры равновесия между II и III модификациями примерно на 50 К.

- [1] Edward D.A. Z. Kristallogr. V. **80**. P. 154. (1931).
- [2] Tahvonen P.E. Ann. Acad. Sci. Fennical. V. **44**. P. 20. (1947).
- [3] Nimmo J.K., Lucas B.W. Acta Cryst. B. **32**. P. 1968. (1976).
- [4] Pauling L., Sherman J. Z. Kristallogr. V. **84**. P. 213. (1933).
- [5] Korhonen U. Ann. Acad. Sci. Fennical. V. **1**. P. 150. (1953).
- [6] Kennedy S.W., Odlyha M. Aust. J. Chem. V. **27**. P. 1121. (1974).
- [7] Алекперов Ч.М., Насиров В.И., Магеррамова Ф.Г., Асадов Ю.Г. Препринт, ИФАН Азерб., № **4**. С. 38. (1990).
- [8] Zamali H., Jemal M. J. Phase Equilibria. V. **16**. P. 235. (1995).
- [9] Барышков С.В., Чарная Е.В., Стукова Е.В. и др. ФТТ. Т. **52**. С. 365. (2010).
- [10] Kangcheng Xu. J. Mater. Sci. V. **34**. P. 3447. (1999).
- [11] Liu J., Duan C., Ossovski M., Mei W., Smith R.W., Hardy J.R. J. Sol. State. Chem. V. 160. P. 222. (2001).
- [12] Secco E.A., Secco R.A. J. Phys. and Chem. of Solids, V. **63**, No. 3. P. 433. (2002).
- [13] Schlemper E.S., Hamilton W.C. J. Chem. Phys. V. 45. P. 408. (1966).
- [14] Nasirov V.I., Hazieva A.F., Asadov Yu.G. Cryst. Reports. V. 56, P. 1077. (2011).
- [15] Асадов Ю.Г., Насиров В.И. Кристаллография, В. **17**, №5, С. 991. (1972).

Кинетика работы фототранзистора с тонкой пленкой на основе фуллерена и фотохромного полимера

Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б., Салихов Т.Р.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
e-mail: ilnur9409@mail.ru

Для работы фототранзисторов важно активный слой и фоточувствительное вещество активно исследуются новые производные фуллерена и спиропирана [1,2]. Так же полимерные материалы находят применение для фоторезисторов и элементов памяти[3,4].

В данной работе исследованы полевые фототранзисторы, полученные на подложках из стекла с ИТО, разными активными слоями и транспортным каналом из С60. Контакты сток-исток из алюминия. Измерены вольтамперные характеристики, максимальные токи доходили до уровня 0,8 мкА. Замечено различие в кинетических характеристиках (Рис. 1). Для одного фоточувствительного вещества характерно равномерное нарастание тока от времени облучения, для другого лавинообразное. Однако для первого имеется момент сохранения фототока после отключения облучения.

Изучены вольтамперные характеристики, наблюдали отсутствие зависимости выходного тока от V_{DS} и зависимость выходного тока от V_G с минимальными значениями в режиме сильного облучения. Такой эффект объясняется увеличением концентрации носителей, индуцированных затвором, по сравнению с фотогенерированными в области канала. Исследование выполнено в рамках государственного задания (код научной темы FZWU-2023-0002)

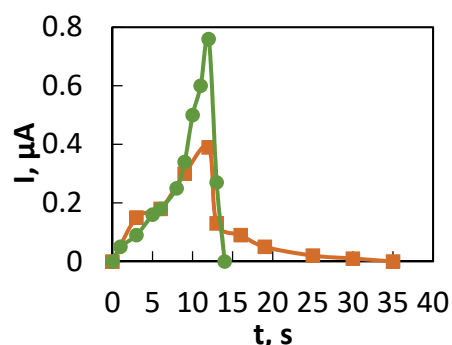


Рис.1 Кинетика двух фототранзисторов с разными активными слоями.

Список литературы

- [1] Salikhov R.B., Mullagaliev I.N., Salikhov T.R. В книге: Functional materials. Book of abstract, P., 207. (2021).
- [2] Tuktarov A.R., Shakirova Z.R., Khalilov L.M., Dudkina Yu.B., Budnikova Yu.H., Salikhov R.B., Safargalin I.N., Dzhemilev U.M. Mendeleev Communications, V. 27, № 2, С. 201-203, (2017).
- [3] Salikhov R.B., Mustafin A.G., Mullagaliev I.N., Salikhov T.R., Sharafullin I.F., Andriianova A.N., Latypova L.R. Materials, V. 15, № 1, (2022).
- [4] Mullagaliev I.N., Andriianova A.N., Salikhov R.B. В книге: Functional materials. Book of abstract, P. 206, (2021).

Синтез композитов тонких пленок Cd_3As_2 с $MnAs$

Аль-Онаизан М.Х.¹, Риль А.И.², Маренкин С.Ф.²

¹ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Москва, Россия

e-mail: m1809132@edu.misis.ru

² Россия, Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
Москва, Россия

e-mail: ril_alexey@mail.ru

Интерес к композитам состоящих из Дираковского полуметалла Cd_3As_2 и ферромагнетика ($MnAs$) обусловлен возможностью создания на их основе высокоэффективных устройств спинтроники обработки и хранения информации [1,2].

В настоящей работе методом вакуумно-термического напыления, из предварительно синтезированных прекурсоров состава 30 мол. % Cd_3As_2 и 70 мол. % $MnAs$, соответственно, были получены тонкие пленки композита. Для оптимизации процесса, исходя из данных по давлению паров над Cd_3As_2 , были проведены расчеты скоростей испарения и конденсации. Проведено исследование структурных свойств композитов Cd_3As_2 - $MnAs$, синтезированных с использованием различных температур подложки. На рис.1 РФА показал, что в пленки состояли из Cd_3As_2 тетрагональной сингонии ($P4_2/nmc$), и $MnAs$ гексагональной сингонии ($P6_3/mmc$). С увеличением температуры подложки увеличился размер кристаллитов Cd_3As_2 , и $MnAs$, и уменьшалась доля аморфной фазы.

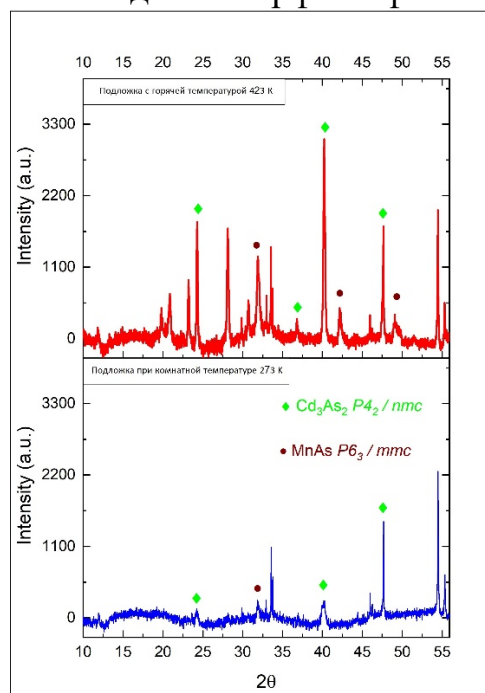


Рис. 1 РФА тонкой пленки композита Cd_3As_2 – $MnAs$.

СЭМ-изображения показали, что пленки, нанесенные на горячую подложку, имеют более высокую степень агломерации, что отражалось на электрических и магнитных свойства пленок. Атомная и магнитно-силовая микроскопия (АСМ и МСМ) показала, что в пленках полученных при более низких температурах наблюдалось более однородное распределение магнитной фазы (рис.2).

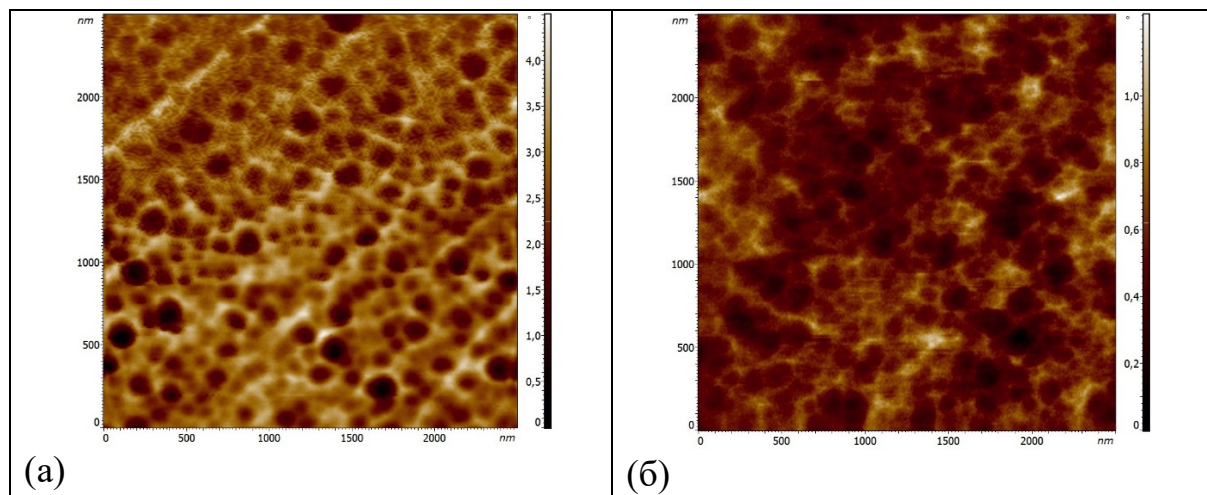


Рисунок 2: а- МСМ осаждения Cd_3As_2-MnAs на подложку при комнатной температуре.
б-МСМ осаждения Cd_3As_2-MnAs на горячую подложку.

Данная работа финансируется грантом РФФ 21-73-20220.

- [1] A.I.Ril', S. F. Marenkin, Russian Journal of Inorganic Chemistry, Vol. 67 (13), pp. 2113–2126, (2022).
- [2] G.M.Stephen, ACS nano, Vol. 15 (3), pp. 5459-5466, (2021).

Массоперенос при выращивании кристаллов Cd_3As_2 с помощью химических транспортных реакций

Нечушкин Ю.Б.¹, Риль А.И.^{2,a}, Маренкин С.Ф.^{1,2,b}

¹ Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»,

Москва, Россия

e-mail: u.nechushkin@mail.ru

² Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

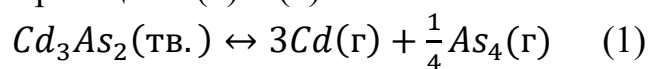
^a e-mail: ril_alexey@mail.ru

^b e-mail: marenkin@rambler.ru

В системе кадмий-мышьяк имеют место стабильные соединения Cd_3As_2 и $CdAs_2$. Арсенид кадмия привлекает внимание учёных благодаря аномально высокой подвижности электронов. Валентная зона и зона проводимости Cd_3As_2 имеют линейный закон дисперсности. Они соприкасаются в зоне Бриллюэна, образуя дираковские узлы и формируя вейлевский полуметалл, при воздействии внешнего магнитного поля приводит к появлению ОМС и сверхпроводящих свойств. [1] В связи с этим большой интерес представляю монокристаллы этого соединения.

Для получения монокристаллов был выбран метод химических транспортных реакций (CVT). Метод CVT позволяет синтезировать качественные монокристаллы арсенида кадмия, при контролируемых размерах, высокой подвижностью носителей и низким остаточным сопротивлением. [2]

В настоящей работе с целью оптимизации условий выращивания монокристаллов, проведено изучение массопереноса Cd_3As_2 . Согласно данным масс-спектральных и тензометрических исследований было установлено, что при нагревании происходят диссоциации Cd_3As_2 согласно реакциям (1) и (2):



На основе данных реакций были произведены вычисления массопереноса в условиях, где действуют молекулярно-кинетический и диффузионный режимы.

Данные по давлениям пара над Cd_3As_2 взяты из работы [3]. Температуры горячей и холодной зон ампулы были выбраны 660 и 450 С, соответственно. При данных условиях скорость испарения составила $2,42 \cdot 10^{-5}$ г/с. Расчетное время синтеза составило 9,3 суток (224 часа).

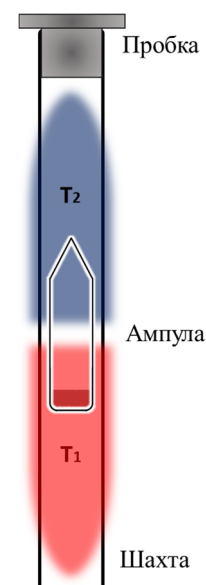


Рис. 1 Схема установки Бриджмана

Вертикальное расположение холодной и горячей зон позволяет уменьшить влияние стенок ампулы на процесс массопереноса, и увеличивает чистоту кристаллов за счет менее летучих примесей (рис. 1).

Синтез образцов проведён из высокочистых элементов Cd и As в пропорции 3:2. Предварительно, Cd_3As_2 был подвергнут дополнительной очистке путём повторной пересублимации в вакууме. Рост кристаллов произведён в кварцевых ампулах с конусовидным концом в течение 9 суток при температурах горячей (T_1) и холодной (T_2) зон 669 и 471 С, соответственно. Выбор конусовидной ампулы обоснован тем, что конусовидная форма ампулы позволяет снизить количество зёрен роста кристалла, тем самым предотвращая образование дополнительных зародышей.

Идентификация образцов осуществлялась методами РФА (рис. 1) и микроструктурного анализа. Согласно этих исследований были получены структурно совершенные монокристаллы Cd_3As_2 относящиеся к тетрагональной сингонии, пространственная группа $I4_1cd$, параметры ячейки $a = 1,27$ нм, $c = 2,54$ нм.

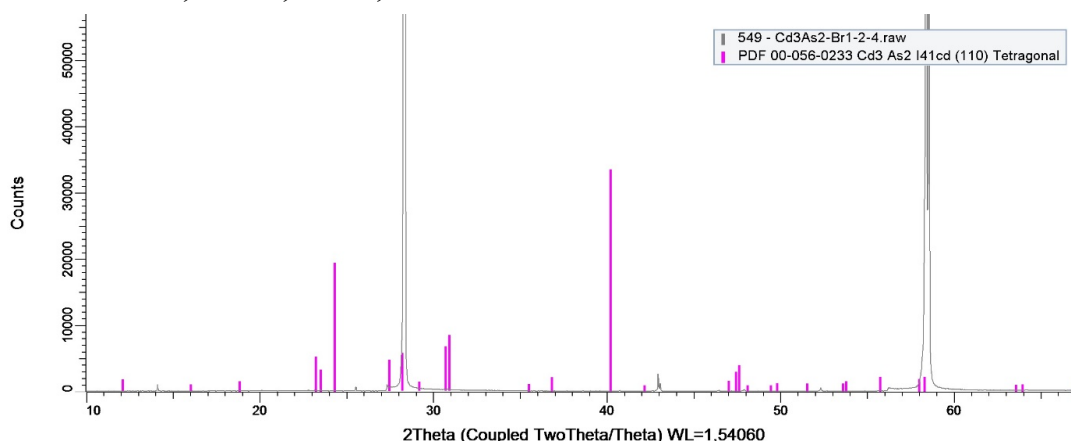


Рис. 2 Дифракционная картина полученного кристалла Cd_3As_2

Работа была выполнена благодаря финансовой поддержке РФФ № 21-73-20220.

- [1] Ril, A. I., & Marenkin, S.F. (2021). Magnetometric Studies of Composite Alloys of the Cd_3As_2 – $MnAs$ System. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 66(10), 1544–1548. <https://doi.org/10.1134/s0036023621100144>
- [2] Yin, C. et al. (2021) Growth of large-scale high-quality Cd_3As_2 single crystals by chemical vapor transport // *Journal of Crystal Growth*, 560. 126029.
- [3] Калевич Е.С., Маренкин С.Ф., Пономарев В.Ф., Шевченко В.Я. Термическая диссоциация Cd_3As_2 // Неорганические материалы, 1978. Том. 14. № 11. С.725

Дискретные бризеры в линейной цепочке магнитных наночастиц

Бычков И.В.¹, Кузьмин Д.А.¹, Екомасов Е.Г.², Шавров В.Г.³

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

³ Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
e-mail: bychkov@csu.ru

Свойствам периодических массивов магнитных наночастиц уделяется внимание достаточно долгое время [1–5]. Помимо их потенциальной прикладной пользы, эти массивы предоставляют удобную платформу для изучения различных нелинейных магнитных волновых явлений [6–8]. Ангармоническая локализация колебаний в решетках занимает особое место среди других нелинейных волновых явлений. Дискретные бризеры (ДБ) [9–12] представляют собой периодические во времени и пространственно локализованные возбуждения. В отличие от своих континуальных аналогов, которые обычно существуют только в интегрируемых системах, ДБ могут существовать в дискретных средах, которые не обязательно описываются интегрируемыми уравнениями. Ранее существование ДБ было предсказано теоретически для цепочек магнитных наночастиц связанных диполь-дипольным взаимодействием [13]. Однако в расчетах предполагалось отсутствие диссипации, а также не учтено наличие размагничивающих полей в наночастицах с конечными размерами. Настоящая работа посвящена исследованию возможности и условий существования ДБ в цепочке магнитных наночастиц, с учетом указанных особенностей. Каждая частица представляет собой эллипсоид с полуосями

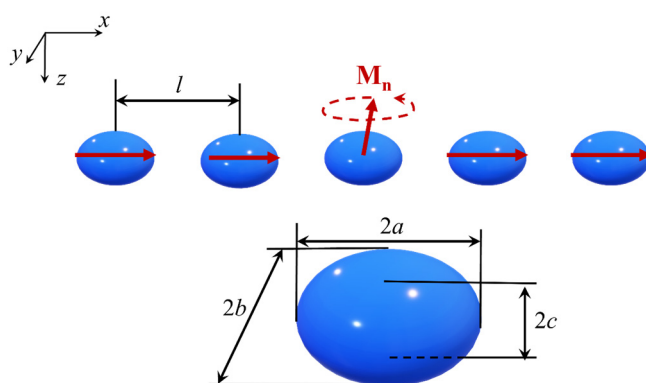


Рис.1 Цепочка магнитных наночастиц эллипсоидальной формы.

a , b и c (см. рис. 1). Предполагается, что размеры частиц и температурный режим, позволяют считать частицы однодоменными с однородным распределением намагниченности.

Моделирование динамики намагниченности в такой цепочке наночастиц проведено в рамках численного решения уравнения Ландау-Лифшица с учетом диссипативного члена в форме Гильберта:

$$\frac{d\mathbf{M}_n}{dt} = -\gamma[\mathbf{M}_n, \mathbf{H}_{eff,n}] + \alpha \left[\mathbf{M}_n, \frac{d\mathbf{M}_n}{dt} \right],$$

$$\mathbf{H}_{eff,n} = \mathbf{H}_{d,n} + \mathbf{H}_{d-d,n} \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{H}_{d,n} = (-N_x M_{x,n}, -N_y M_{y,n}, -N_z M_{z,n})$ – размагничивающее поле, N_i – размагничивающие факторы наночастицы. Эффективное поле, возникающее в системе за счет диполь-дипольного взаимодействия, имеет следующий вид:

$$\mathbf{H}_{d-d,n} = \sum_{k \neq n} \frac{3(\mathbf{M}_k \mathbf{R}_{nk}) \mathbf{R}_{nk} - \mathbf{M}_k |\mathbf{R}_{nk}|^2}{|\mathbf{R}_{nk}|^5},$$

где \mathbf{R}_{nk} – радиус-вектор направленный из центра частицы n в центр частицы k .

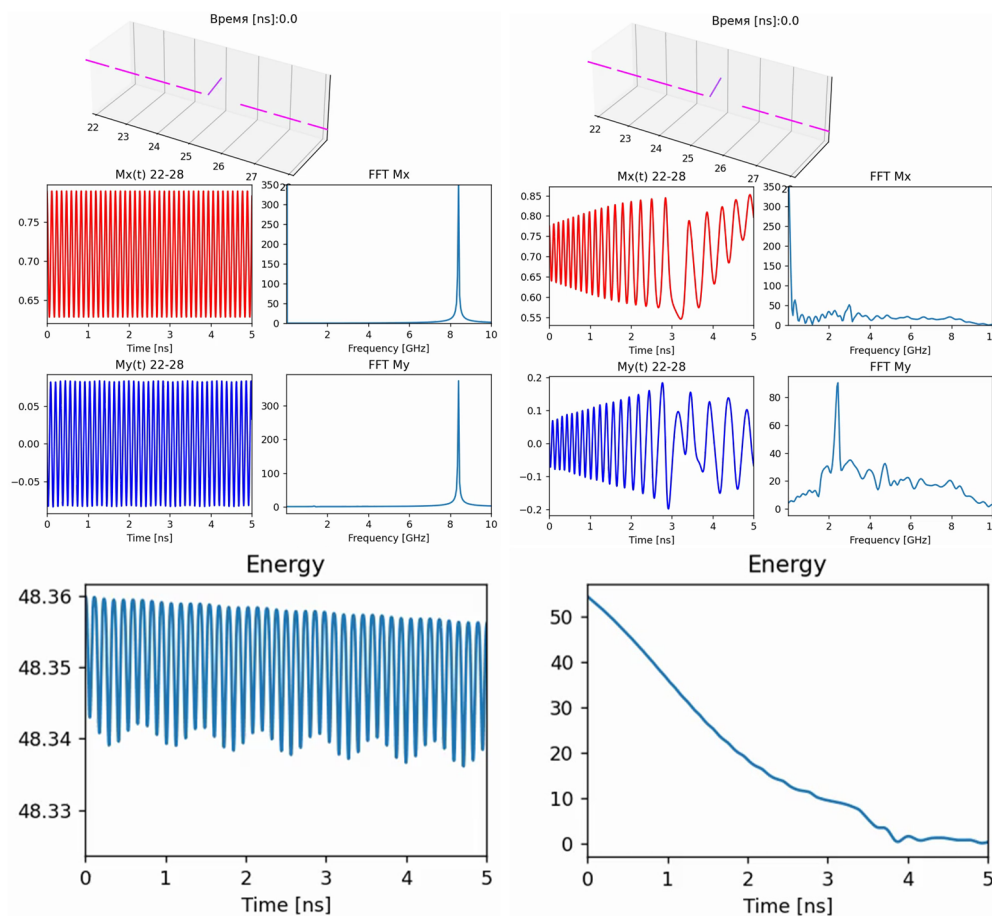


Рис.2 Дискретный бризер в цепочке из 50 наночастиц при отсутствии диссипации (слева) и с учетом диссипации (справа, $\alpha = 0.01$). Приведены временные зависимости компонент суммарной намагниченности частиц с номерами от 22 до 28, их Фурье-спектры и временная эволюция энергии бризера.

В указанной цепочке магнитных наночастиц обнаружено существование ДБ, особенно ярко выраженных в цепочках частиц с $a = b \gg c$ (т.е. близких по форме к дискам). На рис. 2 приведен пример моделирования ДБ в цепочки из 50 наночастиц Ni с размерами $a = b = 100$ нм, $c = 10$ нм и расстоянием между частицами $l = 500$ нм при отсутствии диссипации. При моделировании начальное отклонение 25-й частицы

составляло $M_z = 0.85M_0$, намагниченности всех остальных частиц были направлены вдоль оси x . Без диссипации компоненты намагниченности M_x и M_y совершают осцилляции, в то время как компонента M_z остается практически неизменной. Из спектра Фурье можно оценить собственную частоту ДБ, которая составляет 8 ГГц, отметим, что эта частота определяется начальным отклонением намагниченности. При учете диссипации можно заметить, что происходит постепенное уменьшение частоты ДБ, сопровождающееся увеличением амплитуды колебаний компонент M_x и M_y . Качественное изменение в поведении системы наблюдается в момент времени около 3 нс. Тогда осцилляции намагниченности в плоскости xz сменяются осцилляциями в плоскости yz , т.е. стандартными магнетонными колебаниями около равновесного состояния. Компонента M_x при этом релаксирует к равновесному состоянию $M_x = 1$. В спектре Фурье можно отметить широкую полосу частот колебаний, соответствующую плавному уменьшению частоты колебаний ДБ и пик на частоте 2.5 ГГц в спектре M_y , отсутствующий в спектре M_x , который соответствует частоте линейных магнонов в цепочке. Энергия ДБ также уменьшается с течением времени.

Увеличение размерности системы (2D – решетки магнитных наночастиц) открывает дополнительные возможности для существования нелинейных состояний, связанные с разнообразием симметрии решеток и возможностью существования топологически защищенных состояний в таких системах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 22-19-00355.

- [1] P.C.Waterman, N.E.Pedersen, J. Appl. Phys. **59**, 2609 (1986).
- [2] P. Vavassori et al., J. Appl. Phys. **88**, 999 (2000).
- [3] А.Ю.Галкин, Б.А.Иванов, ЖЭТФ **136**, 87 (2009).
- [4] С.А.Дзян, Б.А.Иванов, ЖЭТФ **143**, 1131 (2013).
- [5] J.E. Park et al., ACS Nano **16**, 3152 (2022).
- [6] T. Shinjo, T. Okuno, R. Hassdorf, K. Shigeto, T. Ono, Science **289**, 930 (2000).
- [7] M.Pardavi-Horvath, G.S.Makeeva, O.A.Golovanov, IEEE Trans. Magn. **44**, 3067 (2008).
- [8] S.Ishizaka, K.Nakamura, J. Magn. Magn. Mater. **210**, 15 (2000).
- [9] A.A. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP **30**, 147 (1970).
- [10] S. Flach and A.V. Gorbach, Phys. Repts. **467**, 1 (2008).
- [11] С.В.Дмитриев, Е.А.Корзникова, Ю.А.Баймова, М.Г.Веларде, УФН **186**, 471 (2016).
- [12] I.G.Bostrem, E.G.Ekomasov, J.Kishine et al., Phys. Rev. B. **104**, 214420 (2021).
- [13] R.L.Pylypchuk, Y.Zolotaryuk, Low Temp. Phys. **41**, 733 (2015).

Эффект резистивного переключения в фазомодулированной структуре на границе раздела $\text{BiFeO}_3/\text{TiO}_2(\text{Nt})$

Рамазанов Ш.М., Гаджиев Г.М., Селимов Д.А., Эфендиева Т.Н.,
Абакарова Н.С.

*Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
e-mail: ramazanv@mail.ru*

Среди устройств энергонезависимой памяти одно из ведущих мест занимает память на основе резистивного переключения. В 1963 г. был открыт эффект электронного переключения в халькогенидных стеклообразных полупроводниках [1], а в 1968 г. эффект переключения с памятью в этих материалах [2], обусловленный фазовым переходом (кристаллизацией) [3]. В начале 70-х годов Чуа [4] предложил теоретическую модель, описывающую соотношения между приложенным к элементу напряжением и интегралом тока по времени, основной элемент схемы в которой назвал "мемристором". Мемристор можно описать как двухполюсник с нелинейной ВАХ, обладающий определенным гистерезисом. Наиболее сильным выражением этого эффекта является появление на ВАХ однородного участка падающего участка, на котором дифференциальная проводимость $\sigma = dj/dE$ – отрицательная величина. Как и в синапсе, сопротивление мемристора изменяется в зависимости от импульсов, подаваемых на "пресинаптические" и "постсинаптические" окончания, таким образом реализуя правила пластичности в зависимости от времени и частоты импульсов. Главные требования к энергонезависимой памяти следующего поколения – масштабируемость (<10 нм) и уменьшение тока переключения (<100 мкА). Эффект переключения (RS) в сегнетоэлектрических материалах может быть вызван модуляцией межфазных барьеров за счет изменения поляризации, миграции ионных дефектов, захвата/высвобождения носителей заряда, а также образования и разрыва проводящей нити.

Объектом исследования в данной работе является мемристорная структура на основе $\text{BFO}/\text{TiO}_2(\text{Nt})\text{-Ti}$. Пленки феррита висмута (BFO) были получены методом атомного-слоевого осаждения на поверхности нанотрубок диоксида титана. BFO интересен благодаря высоким значениям температуры Кюри и Нееля, распределению и связи магнитных и сегнетоэлектрических доменов, топологии сосуществующих магнитных и сегнетоэлектрических доменных структур. В процессе получения пленок BFO из-за перераспределения элементов $\text{Ti} \leftrightarrow \text{Fe}$ на границе раздела пленка-подложка формируется новая слоистая структура – фаза Ауривилиуса, состоящая из бинарной системы $\text{BiFeO}_3\text{-Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$. Слоистые сегнетоэлектрики, часто называемые естественными сверхрешетками, обладают функциональными возможностями, превосходящими

функциональные возможности классических сегнетоэлектрических перовскитных соединений, обусловленными их сильно анизотропной структурой.

На рисунке 1 представлены изображение скола структуры, полученное просвечивающей электронной микроскопией (ПЭМ), и график, демонстрирующий эффект резистивного переключения в образце.

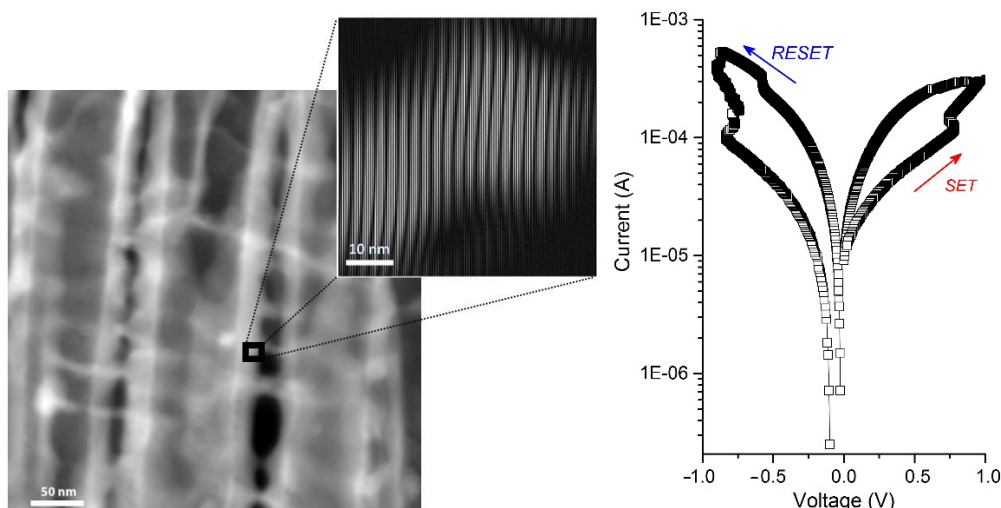


Рисунок 1. ПЭМ изображение скола структуры $BFO/TiO_2(Nt)$ (слева) и ВАХ режима переключения RS (справа)

Результаты фотоэлектронной спектроскопии показали наличие кислородных вакансий, образовавшихся за счет изменения степеней окисления металлических компонентов в структуре. Фурье-анализ области, исследованной ПЭМ с высоким разрешением (см. вставку на рисунке 1) позволил визуализировать 1D фазомодулированные структуры, состоящие из двух различных слоистых фаз Ауривиллиуса с чередованием 5 и 6 перовскитоподобных слоев. Переход между слоями с разным числом блоков сопровождается дефектами упаковки в слое $(Bi_2O_2)^{2+}$. Такие границы раздела между 5- и 6-слойными блоками могут приводить к сложным деформациям и искажениям. Структура перовскита при этом сохраняется, а в определенных областях появляются регулярные искажения решетки без изменения общей схемы и образования областей с морфотропными фазовыми границами. Такие участки возможно связаны с замещением ионов $Fe^{3+} \leftrightarrow Ti^{4+}$ в октаэдрических ячейках в узком диапазоне.

Резистивное переключение в образце было измерено при подаче двунаправленного треугольного сигнала на контакты в "сендвич" конфигурации. В мемристорных структурах за счет формовки снижается сопротивление на несколько порядков. При переходе в низкоомное состояние в образце образуются металлические каналы с высокими значениями проводимости. Увеличение и уменьшение проводимости металлической нити внутри слоя диэлектрика во время восходящей и

нисходящей фазы возникает в результате высвобождения электронов, захваченных в потенциальных ямах, описываемого механизмом проводимости Пула-Френкеля.

Таким образом, формирование в структуре ВFO/TiO₂(Nt)-Ti искусственно модулированной фазы (одномерного периодического потенциала) способствует существенному изменению энергетического спектра электронов. Подобное квазистабильное состояние, распространенное по всему объему слоистой структуры образца, позволит работать при низком напряжении (<1.0 В) и высоких скоростях переключения (<100 нс), что важно для снижения вклада тепловых эффектов в наноэлектронных устройствах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №23-22-00421).

- [1] Б.Т. Коломиец, Э.А. Лебедев. Радиотехника и электроника, 8, 2097 (1963).
- [2] S.R. Ovshinsky. Phys. Rev. Lett., 21 (20), 1450 (1968).
- [3] S.R. Ovshinsky. J. Non-Cryst. Sol., 2, 99 (1970).
- [4] Chua, L., IEEE Trans Circ Th 18, 507 (1971).

Фазовые переходы и критические свойства системы [$x\text{H}_2\text{O} + (1-x)\text{C}_7\text{H}_{16}$], $x=0.407$ мольных долей

Ибавов Н.В., Назаревич Д.А.

Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: nabi79@mail.ru

Методом высокотемпературного адиабатного калориметра Х.И. Амирханова экспериментально исследована температурная зависимость изохорной теплоемкости системы н-гептан – вода [$x\text{H}_2\text{O} + (1-x)\text{C}_7\text{H}_{16}$], $x=0.407$ м.д. Экспериментальная установка и используемая методика подробно описано в работе [1].

Параметры фазовых переходов (T_s , P_s), для данной изохоры $\rho=\text{const}$, определяли по скачкам на температурной зависимости изохорной

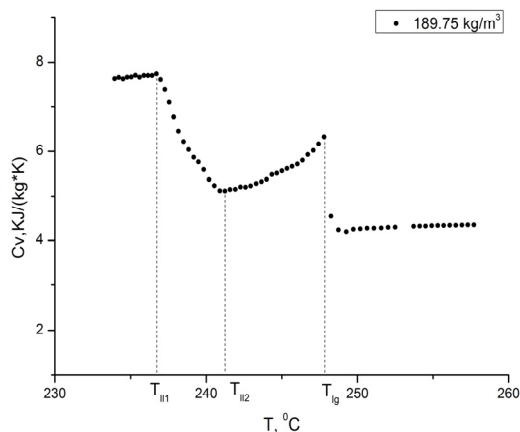


Рис.1 Зависимость теплоемкости от температуры системы н-гептан – вода для состава 0.407 мол. долей H_2O

теплоемкости Рис.1 и температурных зависимостей производных давления $(\partial P/\partial T)_\rho$ Рис.2., которые хорошей точностью позволяют определять параметры фазовых переходов.

Настоящая работа является продолжением экспериментального исследования ранее изученной нами системы н-гептан-вода, составов $x=0.147$ м.д., $x=0.295$ м.д., $x=0.355$ м.д. и $x=0.382$ м.д. воды, в сторону увеличения концентрации воды в смеси.

В данной работе на основе эксперимента по измерению изохорной теплоемкости и давления исследована система [$x\text{H}_2\text{O}+(1-x)\text{C}_7\text{H}_{16}$], для $x=0.407$ м.д. воды, по 7 изохорам в диапазоне плотностей $179.8 \text{ кг}/\text{м}^3 \div 379.9 \text{ кг}/\text{м}^3$ и температур $120 \div 280 \text{ }^\circ\text{C}$.

Измерения начинали из области трехфазного состояния жидкость-жидкость-пар в направлении повышения температуры. Как было отмечено ранее [1], на температурной зависимости теплоемкости по изохорам системы н-гептан – вода обнаружены два скачка теплоемкости Рис.1, которые соответствуют фазовым переходам жидкость-пар (LG) и жидкость-жидкость (LL).

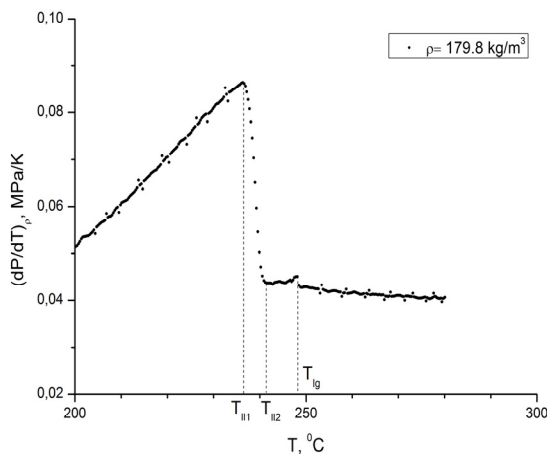


Рис.2 Зависимость $(\partial P/\partial T)_\rho$ от температуры системы *n*-гептан – вода для состава 0.407 мол. долей H_2O

Используя свойства максимума теплоемкости и обнуления скачка производной $(\partial P/\partial T)_\rho$ в переходе LG на критической изохоре [1,2], определены критические параметры ($T_c=247.09$ °C, $P_c=6.18$ МПа) системы $[xH_2O+(1-x)C_7H_{16}]$, для $x=0.407$ м.д. воды.

Результаты эксперимента показывают, что добавление воды в *n*-алкан, приводит к снижению температуры фазового перехода. Кривая фазового равновесия жидкость-пар, смещается относительно вершины кривой жидкость-пар *n*-гептана, в сторону более низких температур. Добавление $x=0.407$ м.д. воды в систему *n*-гептана-вода, приводит к снижению критической температуры гептана ($T_c \approx 267$ °C) на 20 °C и росту критического давления *n*-гептана ($P_c=2.78$ МПа).

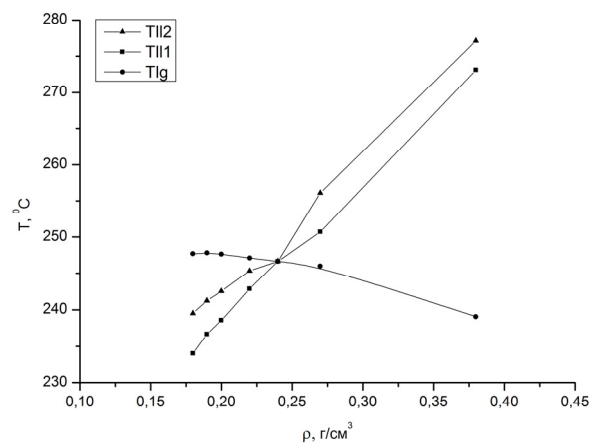


Рис.3 Кривые фазового равновесия жидкость-пар (LG) и жидкость-жидкость (LL) системы *n*-гептан – вода для состава 0.407 мол. долей H_2O

[1] Мирская В.А., Ибавов Н.В., Назаревич Д. А. Фазовые равновесия и критические свойства системы $[xH_2O+(1-x)C_7H_{16}]$, $x=0.355$ мол.долей. ТВТ, 2021, Т. 59, № 2, С. 178-182.

[2] Voronov V.P., Gorodetskii V.V., JETP Lett. 2000, 72: 516.

На температурной зависимости производной $(\partial P/\partial T)_\rho$ наблюдается два скачка Рис.2, которые также соответствуют фазовым переходам LL и LG. Величины скачков и их очередность зависит от плотности залитой в калориметр смеси.

По определенным таким образом параметрам фазовых переходов, построены кривые фазового равновесия жидкость-жидкость и жидкость-пар Рис.3.

Электрические свойства керамики $V_{i0.9}Sm_{0.1}FeO_3$, синтезированной методом искрового плазменного спекания

Садыков С.А.¹, Каллаев С.Н.², Алиханов Н.М.-Р.¹

¹Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

²Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

Исследованы диэлектрические свойства и ас – проводимость керамики $V_{i0.9}Sm_{0.1}FeO_3$, синтезированной по технологии искрового плазменного спекания нанопорошка. Измерения диэлектрических свойств (ϵ_r , $\tan \delta$) и проводимости σ_{ac} выполнены в диапазоне частот 1 кГц – 1 МГц в интервале температур 25 – 500 °С. При этом оба параметра ϵ_r и $\tan \delta$ проявляют характерную для релаксоров частотную зависимость. Уменьшение ϵ_r в области высоких частот является следствием снижения вклада дипольной и межфазной поляризации с ростом частоты. На более высоких частотах эффективна электронная поляризация. Установлена сильная частотная дисперсия σ_{ac} при температурах до 300°С. При более высоких температурах (вблизи температуры Нееля) проводимость практически перестает зависеть от частоты, которую можно идентифицировать как dc-проводимость.

По наклону кривых $\ln \sigma = f(1/T)$ спектра проводимости σ_{ac} определены энергии активации E_a носителей заряда. Обсуждается роль кислородных вакансий в проводимости. Вид зависимости $\sigma_{ac}(T)$ при различных температурах указывает на ее термоактивационный характер, причем энергия активации E_a уменьшаются с ростом частоты. Анализ

частотной зависимости проводимости $\sigma_{ac}(\omega)$ при различных температурах проведен на основе универсального степенного закона Джоншера $\sigma \sim \omega^s$, где ($0 < s < 0,7$). Показано, что с ростом температуры показатель s уменьшается и при высоких температурах стремится к нулю. Такое поведение $s(T)$ ассоциируется с прыжковым механизмом в представлениях модели коррелированных барьерных прыжков (correlated barrier hopping (CBH)).

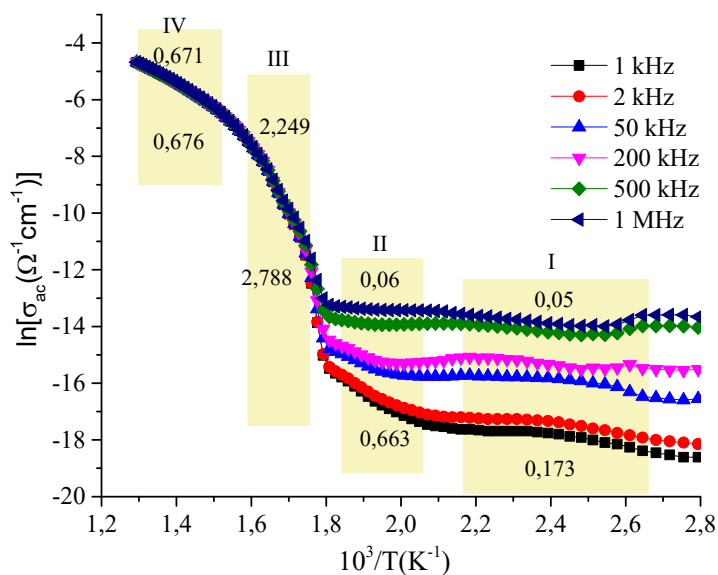


Рис. 1. Температурная зависимость проводимости $V_{i0.9}Sm_{0.1}FeO_3$.

АВТОРСКИЙ СПИСОК

<p style="text-align: right;">A</p> <p>Abdullayev N.A. 151</p> <p>Ahmadova Kh.N. 220</p> <p>Aliev Z.S. 151</p> <p>Aliguliyeva K.V. 151</p> <p>Aliyeva Sh.N. 220</p> <p>Amiraslanov I.R. 151</p> <p>Ari-Gur P. 217</p> <p style="text-align: right;">C</p> <p>Canadell E. 91</p> <p>Chulkov E.V. 151</p> <p style="text-align: right;">G</p> <p>Gareeva Z.V. 146</p> <p>Gebara P. 219</p> <p>Guslienko K.Y. 146</p> <p style="text-align: right;">I</p> <p>Ibragimov GB 53</p> <p style="text-align: right;">J</p> <p>Jabarov S.H. 220</p> <p style="text-align: right;">L</p> <p>Le Ngo Thi Hong 16</p> <p>Lyubovskii R.B. 91</p> <p style="text-align: right;">M</p> <p>Mamedov N.T. 151</p> <p>Manh Do Hung 16</p> <p>Mustafabeyli A.Sh. 53</p> <p style="text-align: right;">P</p> <p>Pesotskii S.I. 91</p> <p style="text-align: right;">S</p> <p>Safargalin I.N. 194</p> <p>Salikhov R.B. 194</p> <p>Shilov G.V. 91</p> <p style="text-align: right;">T</p> <p>Thu Phung Thi 16</p> <p>Torunova E.I. 91</p> <p style="text-align: right;">Z</p> <p>Zhilyaeva S.A. 91</p> <p>Zverev V.N. 91, 151</p> <p style="text-align: right;">A</p> <p>Абакарова Н.С. 291</p> <p>Абдулкадирова Н.З. 219, 228</p> <p>Абдуллаев Н.А. 184</p> <p>Абин Д.А. 27, 104</p>	<p>Абуев Г.Я. 63</p> <p>Абуев Я.К. 55</p> <p>Аверкиев Н.С. 161</p> <p>Агаларов А.М. 257</p> <p>Акманова Г.Р. 138, 141</p> <p>Алибеков А.Г. 190</p> <p>Аливердиев А.А. 254</p> <p>Алигулиева Х.В. 184</p> <p>Алиев А.Д. 118</p> <p>Алиев А.М. 214, 216, 228, 233, 219</p> <p>Алиев А.Р. 243, 251</p> <p>Алиев З.А. 243</p> <p>Алиев З.С. 184</p> <p>Алиев М.А. 241, 251</p> <p>Алиев Р.М. 254</p> <p>Алиева Ш.Н. 226</p> <p>Алиханов Н.М.-Р. 296</p> <p>Аллилуев А.Д. 100</p> <p>Алыев Ю.И. 126</p> <p>Аль-Онаизан М.Х. 284</p> <p>Амирасланов И.Р. 184</p> <p>Амирова А.А. 254</p> <p>Антонец И.В. 180</p> <p>Антонов Г.И. 163</p> <p>Аплеснин С.С. 165, 241</p> <p>Асадчиков В.Е. 267</p> <p>Асриян Н.А. 100</p> <p>Асхабов А.М. 7, 251</p> <p>Атаева Г.Я. 55</p> <p>Ахмедов И.Р. 243</p> <p>Ахмедова Х.Н. 226</p> <p style="text-align: right;">B</p> <p>Бабаев А.Б. 6, 55, 63,</p> <p>Бабаев М.А. 55, 63</p> <p>Бабушкин А.Н. 122, 157, 260, 263</p> <p>Бадиев М.К. 50</p> <p>Байрамлы Р.Б. 279</p> <p>Барышникова О.В. 135</p> <p>Баталин О.Ю. 87</p> <p>Батдалов А.Б. 214, 219</p> <p>Батулин Р.Г. 104</p> <p>Бейбалаев В.Д. 254</p>
--	--

Бекболатов А.М.	243
Белим С.В.	33
Биккулова Н.Н.	138, 141
Блинов М.И.	196
Блинова Е.Н.	47
Богданов А.Е.	204
Богданов Е.В.	95, 97
Боков А.В.	57
Болдырев К.Н.	133
Бондарев В.С.	95
Бражкин В.В.	80, 60
Булейко В.М.	103
Булейко Д.В.	103
Бычков И.В.	175, 217, 288

В

Вакилов А.Н.	60
Васин М.Г.	78
Васинович Е.В.	35, 73
Вафина Н.Г.	87
Вахитов Р.М.	172
Веселова С.В.	27
Ветошко П.М.	217
Власов Р.В.	24
Волков Ю.О.	267
Волкова Я.Ю.	260, 263
Волосников Д.В.	239

Г

Гаджиалиев М.М.	190, 157
Гаджиев А.Б.	216
Гаджиев А.М.	157,
Гаджиев Г.М.	291
Гаджиев Т.М.	241, 251
Гаджимурадов Т.А.	257
Галимзянов Б.Н.	26
Галлямов Э.М.	135
Гамзатов А.Г.	214, 216, 219, 228
Гасанов С.Ш.	67
Гасанова Х.А.	226
Герасимова Ю.В.	241
Глазов М.М.	22, 170
Гоева Л.В.	118
Горев М.В.	95, 97
Горев Р.В.	168
Грановский А.Б.	196
Гратовски С.В.	16, 217, 235

Гречишкин Р.М.	235
Грешнякова С.В.	206
Григорьев Б.А.	103, 254
Гриднев С.А.	117
Гулиева Х.М.	126, 131
Гусейнов М.М.	247

Д

Дашдемиров А.О.	124
Дейнеко Д.В.	83, 93, 135
Джабаров С.Г.	131, 226
Дихтяр Ю.Ю.	129, 133
Доронина М.А.	26
Дубенко И.С.	196
Дунаевский С.М.	230

Е

Евстафьева М.	16
Евстафьева Ю.К.	153
Екомасов Е.Г.	163, 271, 273, 288
Елистратов А.А.	100, 108

З

Заворотнев Ю.Д.	44
Залетова И.А.	200, 206
Заричняк Ю.П.	254
Захаров Н.А.	118
Захарова Т.В.	118
Захвалинский В.С.	157, 190
Звездин К.А.	163
Зверев В.Н.	184
Зобкало И.А.	198

И

Ибавов Н.В.	294
Ибаев Д.Г.	63
Ибрагимова С.И.	126, 131
Иржак А.	16
Исхакова Э.И.	210

К

Кабанов Д.К.	271, 273
Кадырбардеев А.Т.	228
Какагасанов М.Г.	243
Каллаев С.Н.	296
Камаева Л.В.	106
Каманцев А.П.	233, 217
Канбеков Р.Р.	172
Караштин Е.А.	168
Карпухин Д.А.	217

Карцев А.	16	Манцевич В.Н.	161
Каюмова Э.М.	210	Маренкин С.Ф.	157, 190, 284, 286
Киселев М.Р.	118	Мартиросян И.В.	27, 111
Кичанов С.Е.	226	Маслов Д.А.	20
Ковалев О.Е.	231	Маслова Н.С.	161
Коваль Е.М.	118	Матвеев В.В.	118
Коледов В.В.	16, 47, 217, 235	Матвеева А.Н.	198
Колесов К.А.	217	Маширов А.В.	217, 233
Кондаков И.В.	83	Мельникова Н.В.	157
Кочура А.В.	190	Меньшикова С.Г.	80
Кошкидько Ю.С.	217	Метлов Л.С.	47
Кравченко З.Ф.	231	Мехтиев Т.Р.	226
Крамынин С.П.	251	Михайленко Е.К.	230
Кугель К.И.	23	Михайлов В.И.	231
Кудасов Ю.Б.	20	Михайлова И.К.	27
Кузнецов А.С.	217	Михалева Е.А.	95
Кузьмин Д.А.	175, 217, 288	Мокшин А.В.	24, 26, 266
Кулевой Т.В.	104	Морозкин А.В.	204
Куликов В.Д.	275	Морозов В.А.	129, 133
Курбангулов А.Р.	138, 141	Москвин А.С.	35, 73
Курбанова Д.Р.	75	Мосунов А.В.	135
Курганская А.А.	204	Муллагалиев И.Н.	283
Кутов А.Х.	141	Мунасыпов И.М.	138
Кутов А.Х.	138	Мурсакулов Н.Н.	126
	Л	Муртазаев А.К.	6, 34, 40, 42, 50, 55, 61, 63, 70, 75, 168
Лазорьяк Б.И.	133, 135	Муртазаев К.Ш.	34
Латипов Е.В.	83	Мусабилов И.И.	216
Лебедев А.В.	108		Н
Левченко А.А.	270	Набиева А.Х.	222
Лега П.В.	16	Наджафов Г.Н.	279
Либман М.А.	47	Назаревич Д.А.	294
Лобанов И.С.	12	Назаров В.Н.	273
Лозовик Ю.Е.	100	Насиров В.И.	279
	М	Насиров Э.В.	279
Магадеев Е.Б.	172	Нечушкин Ю.Б.	286
Магницкая М.В.	57	Никифоров И.В.	93
Магомедов М.А.	34, 40, 42, 50, 61, 67, 70, 75	Николаев С.Н.	196
Магомедова Л.К.	70	Нуждин А.Д.	267
Мазагаева М.К.	40		О
Макаров Д.В.	100	Овченкова Ю.А.	204
Макеев М.Ю.	36	Омарова А.А.	70
Мамедов Д.В.	170	Орлов А.	16
Мамедов Н.Т.	184	Осипов М.А.	27
Мамонова М.В.	36, 153		

П			
Павлов А.	16	Скрипов П.В.	239
Петров А.В.	111	Соколовский Д.Н.	260, 263
Петров А.О.	217	Спасский Д.А.	129
Пирмагомедов З.Ш.	190	Стариковский А.С.	27, 104
Поволоцкий И.И.	239	Стефанович С.Ю.	83, 135
Покровский С.В.	27, 104, 111	Страумал Б.Б.	44
Попов И.И.	117	Стрельцов С.В.	11, 23
Посохова С.М.	129, 133	Суслов Д.А.	217
Поткина М.Н.	12	Т	
Прокунин А.В.	16, 217	Тааев Т.А.	168
Прудников В.В.	36, 153	Тарасенко Т.Н.	231
Прудников В.Н.	196	Таскаев С.В.	217
Прудников П.В.	153	Тебеньков А.В.	157
Прянишников К.Е.	104	Темников Ф.В.	23
Псиола Е.В.	93	Терёшина И.С.	15, 204
Р		Титков В.В.	83
Рамазанов М.К.	34, 50, 61, 75	Титова Е.А.	260
Рамазанов Р.М.	40	Тихомиров И.В.	33
Рамазанов Ш.М.	291	Тихонов А.М.	267
Ремизов С.В.	108	Томашевская Е.Ю.	44
Ризванова Т.Р.	61	Тюменцев В.А.	114
Риль А.И.	157, 190, 284, 286	У	
Рожанский И.В.	161	Удод Л.В.	241
Романов С.	16	Уздин В.М.	12
Романова О.Б.	241	Усик М.О.	175
Роцин Б.С.	267	Устинов В.В.	148
Руднев И.А.	27, 104, 111	Утарбекова М.В.	217
Руткаускас А.В.	226	Ф	
Рыльков В.В.	196	Фазлитдинова А.Г.	114
С		Файрушин И.И.	266
Садыков С.А.	296	Фахретдинов М.И.	271
Сайпулаева Л.А.	157, 190	Федин П.А.	104
Саламатин Д.А.	57	Филиппова В.В.	163
Салихов Р.Б.	188, 283	Флеров И.Н.	95, 97
Салихов Т.Р.	283	Х	
Самсонов К.Ю.	271, 273	Хайруллина Р.Р.	29
Севрюков О.Н.	200	Ханов Л.Н.	233
Селимов Д.А.	291	Харьков А.М.	165, 177
Селин П.Г.	270	Хахвердиева З.Э.	224
Семина М.А.	170	Хачатрян Д.А.	200
Симакова С.С.	33	Хизриев К.Ш.	168
Ситников М.Н.	165, 177	Хизриев Ш.К.	214
Ситников Н.Н.	200, 206	Хомский Д.И.	23
Скороходов Е.В.	168	Хуснуллин В.Р.	263
		Хуснутдинов Р.М.	29

	Ц		Щетников О.П.	122
Цвященко А.В.	57		Э	
Циок Е.Н.	106		Эфендиева М.Р.	254
Цыганкова Л.В.	141, 138		Эфендиева Т.Н.	291
	Ч		Ю	
Чулков Е.В.	184		Юмалин Т.Т.	188
Чуракова А.А.	210		Юнусов М.Б.	29
	Ш		Юсибова И.Ф.	226
Шавров В.Г.	16, 47, 175, 217, 288		Юсупов В.Р.	111
Шелехов Е.В.	118		Я	
Шеляков А.В.	200, 206		Янарсаев А.В.	251
	Щ		Ясюлевич И.А.	148
Щелкачев Н.М.	57, 80, 106			