

**XXII Всероссийская конференция**

**ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ  
ТВЁРДОГО ТЕЛА  
И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ**

**Сочи, пансионат «Буревестник»  
24 сентября – 3 октября 2023 г.**

**ТЕЗИСЫ**

Министерство науки и высшего образования РФ  
Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН  
Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН  
Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова

XXII Всероссийская конференция  
«Проблемы физики твердого тела  
и высоких давлений»

г. Сочи, пансионат «Буревестник»  
24 сентября – 3 октября 2023 г.

ТЕЗИСЫ

Москва, ФИАН 2023

УДК 538.9(043.2)  
ББК В37я431 + В367.1я431

Главный редактор П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН)  
Ответственный редактор В. Е. Анкудинов к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

**Редакционная коллегия:** В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН); В. Н. Рыжов д.ф.-м.н. (ИФВД РАН); А. А. Федянин, д.ф.-м.н., проректор (МГУ им. М. В. Ломоносова); В. Е. Антонов, д.ф.-м.н. (ИФТТ РАН); М. М. Глазов, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН); С. В. Демишев, д.ф.-м.н. (ИОФ РАН); Е. Н. Циок, к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

Проблемы физики твердого тела и высоких давлений:  
К26 Тезисы XXII Всероссийской конференции, г. Сочи, пансионат «Буревестник», 24 сентября – 3 октября 2023 г. – Москва–Сочи: Изд-во ФИАН, 2023. – 162 с.

Problems of solid state physics and high pressure science:  
Abstracts of the XXII All-Russian Conference, Sochi, “Burevestnik” pension, September, 24 – October, 3, 2023. – Moscow–Sochi: LPI RAS Publ., 2023. – 162 p.

**ISBN 978-5-00202-364-6**

XXII Всероссийская конференция «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» продолжает регулярную серию школ, которые проводились Институтом физики высоких давлений РАН каждые два года, начиная с 1989 г. С 2015 года Школа-конференция проводится ежегодно совместно с Физическим институтом РАН. В данный сборник входят как тезисы лекций приглашенных лекторов, так и тезисы оригинальных докладов молодых участников.

**ISBN 978-5-00202-364-6**

УДК 538.9(043.2)  
ББК В37я431 + В367.1я431

© Коллектив авторов, 2023  
© ФИАН, 2023

## От редакции

Всероссийская школа-конференция «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» проводится Институтом физики высоких давлений РАН (первоначально Школа-семинар) каждые два года, начиная с 1989 г. Традиционно такие Конференции проходят осенью на базе обособленного подразделения Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова – пансионата МГУ «Буревестник».

С течением времени увеличивалось количество молодых участников, интерес к участию в Конференции проявлял все более широкий круг ученых. В 2014 году Оргкомитет Конференции принял решение с 2015 года проводить данную конференцию ежегодно, организуя ее по очереди силами Института физики высоких давлений РАН, Физического института РАН и Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, для того, чтобы охватить большой круг молодых ученых. Таким образом, проводимая ИФВД РАН в 2023 году Конференция будет 22-й в общем ряду конференций «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» и будет носить Всероссийский характер.

Целями Конференции являются создание условий, способствующих изучению современных достижений в области физики конденсированных сред, в том числе, с применением высоких давлений; содействие развитию научных исследований в области физики конденсированных сред с применением высоких давлений; привлечение ещё большего количества молодых ученых и содействие развитию их творческой научной активности. В течение последних двадцати лет Конференции организовывались при поддержке РФФИ. Особенностью школы-конференции является обязательное устное выступление с устными докладами всех молодых участников.

Дополнительная информация, тезисы докладов и фотографии будут доступны на сайтах XXII Конференции:

<http://hppi.troitsk.ru/meetings/school/XXII-2023/inform-23.htm>

<http://school.lpi.ru/>

## **ОРГАНИЗАТОРЫ**

Физический институт им. П. Н. Лебедева  
Российской академии наук

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина  
Российской академии наук

Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова

### **ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ**

1. Председатель – П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН)
2. Сопредседатель – В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
3. Заместитель Председателя – А. А. Федянин, д.ф.-м.н., проректор (МГУ им. М. В. Ломоносова)
4. В. Е. Антонов, д.ф.-м.н. (ИФТТ РАН)
5. М. М. Глазов, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН)
6. С. В. Демишев, д.ф.-м.н. (ИОФ РАН)
7. В. Н. Рыжов, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

### **ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

1. Председатель – В. Н. Рыжов, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
2. Заместитель Председателя – А. А. Федянин, д.ф.-м.н., проректор (МГУ им. М. В. Ломоносова)
3. П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН)
4. В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
5. Е. Н. Циок, к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
6. В. Е. Анкудинов, к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
7. З. Н. Волкова, к.ф.-м.н. (ИФМ УрО РАН)
8. А. В. Богач, к.ф.-м.н. (ИОФ РАН)
9. В. Н. Краснорусский (ИФВД РАН)

## СОДЕРЖАНИЕ

От редакции .....	3
СОДЕРЖАНИЕ .....	5

АНИЗОТРОПНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЭКСИТОНОВ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ ИЗ ХАЛЬКОГЕНИДОВ СВИНЦА

Авдеев И. Д., Нестоклон М. О., Гупалов С. В...... 17

3D (H- $\theta$ - $\varphi$ ) ДИАГРАММА РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ  $\text{CeV}_6$  С СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

Азаревич А.Н., Богач А.В., Демишев С.В., Краснорусский В.Н., Шицевалова Н.Ю., Половец С.Е., Филипов В.Б., Воронов В.В., Случанко Н.Е...... 19

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОРИСТЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ  $\text{TiNi}$

Аникеев С.Г., Кафтаранова М.И., Ходоренко В.Н., Артюхова Н.В. 21

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТЕКЛОВАНИЯ С ПОМОЩЬЮ РАСШИРЕННОГО МЕТОДА ФАЗОВОГО ПОЛЯ

Анкудинов В. Е., Васин М. Г...... 22

СПОСОБ ГОРЯЧЕГО ГАЗОСТАТИЧЕСКОГО ПРЕССОВАНИЯ

Антанович А.А...... 24

ОБРАТНЫЙ ИЗОТОПНЫЙ ЭФФЕКТ В СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ГИДРИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Антонов В. Е...... 26

ПРОНИЦАЕМОСТЬ ПОРИСТОГО СПЛАВА НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ СВС

Артюхова Н.В., Аникеев С.Г., Ходоренко В.Н., Кафтаранова М.И., Пахолкина С.А...... 28

АДАМАНТАН В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ: КАРБОНОГИЗАЦИЯ, ГРАФИТИЗАЦИЯ, АЛМАЗООБРАЗОВАНИЕ <b>Баграмов Р.Х.</b> .....	29
ТЕМПЕРАТУРНОЕ И КОНЦЕНТРАЦИОННОЕ ИЗМЕНЕНИЕ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВОВ Al-Zn <b>Баталова Е. А., Камаева Л. В.</b> .....	31
СТРУКТУРА МЯГКИХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОД В АМОРФНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ <b>Конюх Д. А., Бельтюков Я. М.</b> .....	32
ПОВЕРХНОСТНАЯ И АНИЗОТРОПНАЯ ОБЪЕМНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В $ZrV_{12}$ СО СТРУКТУРНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ <b>Богач А.В., Азаревич А.Н., Демишев С.В., Воронов В.В., Шицевалова Н.Ю., Филипов В.Б., Случанко Н.Е.</b> .....	34
ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $CaCo_{2-x}Fe_x$ ( $x=0.02-0.50$ ) МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОГРАФИИ И МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ <b>Покатилов В.С., Русаков В.С., Гапочка А.М., Сигов А.С., Боков А.В., Магницкая М.В., Цвященко А.В.</b> .....	36
ТАЙНЫ ВОДЫ И ДРУГИХ АНОМАЛЬНЫХ ЖИДКОСТЕЙ: «МЕДЛЕННЫЙ» ЗВУК, РЕЛАКСИРУЮЩИЕ СЖИМАЕМОСТЬ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ <b>Бражкин В.В., Данилов И.В., Циок О.Б.</b> .....	38
ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В МОНООКСИДЕ НИКЕЛЯ NiO <b>Вамбольд Н.О., Леонов И.В.</b> .....	40
О ПРИЧИНАХ МЕДЛЕННОЙ РЕЛАКСАЦИИ РАСПЛАВОВ Al- RЗМ ПОСЛЕ ПЛАВЛЕНИЯ <b>Васин М. Г., Шкляев К. Я., Лебедев В. Г.</b> .....	42
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ И СТРУКТУРЫ ГИДРАТА МЕТАНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ <b>Власов Р. В., Мокшин А. В.</b> .....	43

<sup>11</sup>B ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ  
БОРИРОВАННЫХ АЛМАЗОВ

**Волкова З. Н., Филоненко В. П., Баграмов Р. Х.,  
Краснорусский В. Н. .... 44**

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СКРУЧЕННЫХ  
МЕТАПОВЕРХНОСТЕЙ

**Вяткин Е. С., Пошакинский А. В., Тарасенко С. А. .... 46**

РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ФЕРРИТОВ  $La_{1-x}Sr_xFeO_{3-\delta}$

**Гавриличева К. А., Баркалов О. И. .... 48**

ЭФФЕКТ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ И ДАЛЬНИЙ  
МАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В NiO ПОД ДАВЛЕНИЕМ

**Гайфутдинов Г.М., Леонов И.В. .... 50**

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
АМОРФООБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ  
МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

**Галимзянов Б. Н., Доронина М. А., Мокшин А. В. .... 52**

ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС В ФИЗИКЕ  
КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ: ОТ  
ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ К  
НИЗКОРАЗМЕРНЫМ МАГНЕТИКАМ

**Гиппиус А. А. .... 54**

ИЗУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕОДНОРОДНОЙ  
СВЕРХПРОВОДИМОСТИ С ПОМОЩЬЮ ТРАНСПОРТНЫХ  
ИЗМЕРЕНИЙ

**Григорьев П. Д., Кочев В. Д., Сеидов С. С., А.В. Фролов, Орлов.  
А.П., Синченко А.А. .... 55**

РАСЧЕТ ПРОВОДИМОСТИ ДОПИРОВАННЫХ МАНГАНИТОВ  
ОБЛАДАЮЩИХ ЭФФЕКТОМ КОЛОССАЛЬНОГО  
МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ

**Гудин С.А. .... 57**

ПОЛИДИСПЕРСНЫЕ КОЛЛОИДНЫЕ СИСТЕМЫ ВО ВНЕШНИХ  
УПРАВЛЯЮЩИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Гурский К.Д., Демешко Г.М., Крючков Н.П. ..... 59

КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ ДИНАМИКА В  
ПРИСУТСТВИИ МАГНИТНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В СИЛЬНО  
КОРРЕЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ

С.В.Демишев..... 61

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ТЕПЛОВЫХ СВОЙСТВ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ  $Ti_3Al$  И  $Zr_3Al$  СО  
СВЕРХСТРУКТУРОЙ  $L1_2$

Долгушева Е. Б...... 62

АНАЛОГОВОЕ КВАНТОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЗАДАЧАХ  
ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ И КВАНТОВОЙ  
ОПТИКИ

А.А. Елистратов..... 64

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ФИЗИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА САМОПРОДВИЖЕНИЯ  
РЫБОПОДОБНОГО МНОГОЗВЕННОГО ГИБКОГО РОБОТА

Елистратова А. А...... 65

ВОДОРОД В ПОЛЫХ СИЛИКАТНЫХ НАНОСФЕРАХ

Ефимченко В.С., Короткова М.А., Мелетов К.П., Масалов В.М.,  
Сухинина Н.С., Емельченко Г.А...... 66

УДАРНОЕ ПЛАВЛЕНИЕ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ В ТИТАНЕ  
ПОСЛЕ УЛЬТРАКОРОТКОГО ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Жаховский В. В., Колобов Ю. Р., Ашитков С. И., Иногамов Н. А.,  
Неласов И. В., Манохин С. С., Хохлов В. А., Ильницкий Д.К.,  
Петров Ю. В., Овчинников А.В., Чефонов О.В., Ситников Д. С. . 68

ПОВЕРХНОСТНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В  $SmB_6$  И  $Sm_{1-x}Yb_xB_6$  ( $x \leq 0.1$ )

Журкин В.С., Божко А.Д., Анисимов М.А., Кудрявцев О.С.,  
Шицевалова Н.Ю., Филипов В.Б., Глушков В.В. ..... 70

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ  
КОМПАКТНЫХ ПОРАЖАЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ

**Залозный В.А., Запорожченко Я. И., Красникова А.Г..... 72**

ТРИ ИСТОЧНИКА И ТРИ СОСТАВНЫХ ЧАСТИ УСПЕШНОЙ  
НАУЧНОЙ ПУБЛИКАЦИИ

**Захарова Е. В. .... 73**

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ВЫСШЕГО БОРИДА  
ВОЛЬФРАМА

**Зибров И.П., Филоненко В.П..... 75**

ЛАЗЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ВЫСОКИЕ ДАВЛЕНИЯ

**Иногамов Н. А., Жаховский В. В., Петров Ю. В., Хохлов В. А.,  
Ашитков С. И., Ромашевский С. А., Ситников Д. С.,  
Хищенко К. В., Колобов Ю. Р., Неласов И. В., Манохин С. С.,  
Шепелев В. В. .... 77**

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ОБРАЗОВАНИЕ  
КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФАЗ В СПЛАВАХ AL-CU-(FE,CO)

**Камаева Л. В., Бронникова Ю.И., Суслов А. А., Бражкин В. В.. 79**

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СПИНОВОГО И АБРИКОСОВСКОГО  
ВИХРЕЙ В ДОПИРОВАННОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ

**Капранов А. В., Акзянов Р. Ш., Рахманов А. Л. .... 81**

КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ И СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ

**Капуткина Н. Е., Алтайский М. В..... 82**

МАРТЕНСИТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ПОРИСТЫХ СПЛАВАХ НА  
ОСНОВЕ TiNi ПОСЛЕ МОДИФИКАЦИИ ПОРОВОГО  
ПРОСТРАНСТВА ПУТЕМ ХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ

**Кафтаранова М.И., Ходоренко В.Н., Аникеев С.Г., Артюхова Н.В. 84**

ВЗБИРАЯСЬ ПО СПИНОВЫМ ЛЕСТНИЦАМ В MoOBr<sub>3</sub>

**Воробьева А., Комлева Е., Морозов И., Гайдорф М., Захаров К.,  
Зайкина А., Васильчикова Т., Овченков Е., Шванская Л.,  
Стрельцов С., Васильев А., Волкова О. .... 85**

СВОЙСТВА АЛМАЗНОЙ МЕТАПОВЕРХНОСТИ ИК  
ДИАПАЗОНА, СОЗДАННОЙ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ  
**Комленок М. С., Курочицкий Н. Д., Седов В. С., Клименко О. А.,  
Дмитриева О. А., Тиходеев С. Г.**..... 87

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ  
СПЕКТРЫ КЕРАМИКИ МАГНОНИОБАТА СВИНЦА  
**Королева Е. Ю., Соцкова Ю.Н., Молоков А., Вакуленко А.Г.,  
Вахрушев С.**..... 88

ПЕРЕХОД ОТ НЕПРЯМОЙ К ПРЯМОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЕ В  
ТОНКИХ СЛОЯХ  $\beta$ -InSe  
**Котова Л.В.** ..... 89

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ САМОСБОРКИ  
КВАЗИДВУМЕРНЫХ КОЛЛОИДНЫХ СТРУКТУР В УСЛОВИЯХ  
КОНФАЙНМЕНТА  
**Кохановская А. В., Широкова А.А., Крючков Н. П., Яковлев Е. В.** 90

ОЦЕНКА РАЗМЕРОВ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ОСТРОВОВ НА  
ФОНЕ ВОЛНЫ СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ В ОРГАНИЧЕСКИХ  
МЕТАЛЛАХ  
**Кочев В. Д., Сеидов С. С., Григорьев П. Д.**..... 92

САМОСБОРКА ЦЕПОЧЕЧНЫХ СТРУКТУР В КОЛЛОИДНЫХ  
СИСТЕМАХ С УПРАВЛЯЕМЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ  
**Крючков Н.П., Насыров А.Д., Шишков И.Н., Кохановская А.В.,  
Яковлев Е.В.** ..... 94

БАБОЧКА ХОФШТАДТЕРА: УРОВНИ ЭНЕРГИИ БЛОХОВСКИХ  
ЭЛЕКТРОНОВ В ДВУМЕРНОЙ РЕШЕТКЕ И  
ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ. ТЕОРИЯ И  
ЭКСПЕРИМЕНТ (ОБЗОР)  
**Ларионов И. А.** ..... 96

ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ НА МЕЖУЗЕЛЬНЫХ  
СОСТОЯНИЯХ В ЭЛЕКТРИДЕ  $\text{Ca}_2\text{N}$   
**Мазанникова М. А., Шориков А.О., Коротин Д. М., Новоселов Д. Ю.** 98

МОДЕЛЬ БЕЗИНВЕРСИОННОГО ТЕРАГЕРЦОВОГО ЛАЗЕРА  
Максимов Т. В., Курбаков И. Л., Лозовик Ю. Е..... 100

ФОТОГАЛЬВАНИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ:  
УПРАВЛЯЕМЫЕ СВЕТОМ МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ КВАНТОВЫЕ  
СОСТОЯНИЯ  
Мельников А.С., Миронов С.В., Буздин А.И., Путилов А.В.,  
Пластовец В.Д., Токман И.Д., Беспалов А.А..... 102

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯДРА ЗЕМЛИ  
Валиулин В. Э., Михеенков А. В., Щелкачев Н. М. .... 103

МЕЖСЛОЕВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В СЛОИСТЫХ МЕТАЛЛАХ В  
УГЛАХ ЯМАДЖИ В СИЛЬНОМ И СЛАБОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ  
Могилюк Т. И., Григорьев П. Д. .... 105

КРОССОВЕР ЖИДКОСТЬ-ЖИДКОСТЬ: КИНЕТИКА  
ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ  
Мокшин А. В., Власов Р. В..... 106

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРА ДЕМПИНГА НА ФАЗОВОЕ  
РАССЛОЕНИЕ ВЫЗВАННОГО АКТИВНОСТЬЮ ЧАСТИЦ В  
УСЛОВИЯХ ДИНАМИКИ ЛАНЖЕВЕНА  
Насыров А.Д., Гурский К.Д., Крючков Н.П. .... 107

ТОПОЛОГИЧЕСКИ ЗАЩИЩЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ В  
ГЕЛИКОИДАЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ  
Ниязов Р.А., Аристов Д.Н., Качоровский В.Ю. .... 109

ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВАЯ ОБРАБОТКА ПОРОШКОВОГО  
МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА  
Пахолкина С.А., Анিকেев С.Г., Артюхова Н.В., Ходоренко В.Н.,  
Кафтаранова М.И., Мамазакиров О..... 110

МЕХАНИЧЕСКИЕ И ДЕМПФИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА ОБЪЕМНО  
СТРУКТУРИРОВАННОГО АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АК6,  
СИНТЕЗИРОВАННОГО СЕЛЕКТИВНЫМ ЛАЗЕРНЫМ  
ПЛАВЛЕНИЕМ  
Петрова А.Н., Бродова И.Г., Кленов А.И., Пильщиков А.А..... 112

ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ НОВОГО AL-CU-MN СПЛАВА  
АЛТЭК

**Петрова А. Н., Распоиенко Д. Ю., Астафьев В. В. ..... 114**

УСТОЙЧИВОСТЬ МАГНИТНЫХ СКРИМИОНОВ В  
СИНТЕТИЧЕСКИХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ

**Поткина М.Н., Лобанов И.С., Уздин В.М., ..... 116**

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА  
СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ СПЛАВА  
Al-Fe, АРМИРОВАННЫХ МАЛЫМИ ДОБАВКАМИ ГРАФЕНА

**Распоиенко Д. Ю., Бродова И.Г., Маркина А.А., Марченков В.В.,  
Елшина Л.А. ..... 117**

НОВАЯ ФИЗИКА НА СТЫКЕ СТАРЫХ МЕТОДОВ:  
ПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС В КВАНТОВОЙ СИСТЕМЕ

**Ремизов С.В., Елистратов А.А...... 119**

РАСЧЕТ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ  
РАСПЛАВОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕЖЧАСТИЧНЫХ  
ПОТЕНЦИАЛОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

**Рыльцев Р. Е., Щелкачев Н. М., Кондратюк Н. Д.,  
Анкудинов В. Е., Балякин И. А., Типеев А. О., Хазиева Е. О...... 121**

ОБ УЛУЧШЕНИИ МАТЕРИАЛЬНЫХ ЛОВУШЕК ДЛЯ  
УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ СО СТЕНКАМИ,  
ПОКРЫТЫМИ ЖИДКИМ ГЕЛИЕМ

**Садовников А.В., Григорьев П.Д., Кочев В.Д., Дюгаев А.М. ..... 123**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЁНОК  
LaNiO<sub>3</sub> В РАМКАХ МЕТОДА DFT+U

**Сажаяев Г.А., Леонов И.В...... 125**

СПОНТАННЫЕ ТОКИ И ГЕНЕРАЦИЯ ВИХРЕЙ В ПЛАНАРНЫХ  
ГИБРИДНЫХ СТРУКТУРАХ СВЕРХПРОВОДНИК /  
ФЕРРОМАГНЕТИК С НЕОДНОРОДНЫМ ОБМЕННЫМ ПОЛЕМ И  
ЭФФЕКТОМ РАШБЫ

**Самохвалов А.В., Буздин А.И...... 127**

ДИНАМИКА ФУНКЦИИ ВИГНЕРА С ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ ПРЕДСТАВЛЕННАЯ В ВИДЕ СВЁРТКИ

**Сеидов С. С.** ..... 129

ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ И МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ САМОСБОРКИ КОЛЛОИДНОЙ МЯГКОЙ МАТЕРИИ

**Симкин И. В., Широкова А.А., Драгун М.А., Крючков Н.П., Либет П.А., Юрченко С.О., Яковлев Е.В.** ..... 131

ВЛИЯНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ НА РЕШЕТОЧНЫЕ, СПЕКТРАЛЬНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СВЕРХПРОВОДНИКА НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА  $YFe_2Ge_2$

**Скорняков С. Л., Анисимов В. И.** ..... 133

АНТИФЕРРОМАГНЕТИКИ  $Rb_{12}$  С ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ СТРУКТУРНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ И ЭЛЕКТРОННЫМ ФАЗОВЫМ РАССЛОЕНИЕМ

**Случанко Н.Е.** ..... 135

МАГНЕТОТРАНСПОРТ В ТРЕХМЕРНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРАХ НА ОСНОВЕ ХАЛЬКОГЕНИДОВ ВИСМУТА И СУРЬМЫ

**Степина Н.П., Баженов А.О., Шумилин А.С., Кунцевич А.Ю., Климова Е.С., Кох К.А., Терещенко О.Е., Жданов Е.С., Ищенко Д.В., Рыбин М. Г.** ..... 137

ЧТО БЫВАЕТ ПОСЛЕ ВИШНЕВКИ?

**Стрельцов С. В.** ..... 138

СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ В НИЗКОСИММЕТРИЧНЫХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ

**Тарасенко С. А.** ..... 139

ИНДУЦИРОВАННОЕ УПРУГИМИ НАПРЯЖЕНИЯМИ ИЗМЕНЕНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ ФОТОЭМИТИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ МУЛЬТИЩЕЛОЧНОГО ФОТОКАТОДА

**Кустов Д.А., Русецкий В.С., Голяшов В.А., Терещенко О.Е.** ..... 140

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$ : РАСЧЕТЫ В РАМКАХ ПОДХОДА DFT+DMFT

**Трифонов И.О., Скорняков С.Л., Анисимов В.И. .... 141**

ДИНАМИКА РЕШЁТКИ И ТЕПЛОЁМКОСТЬ МНОГОСЛОЙНОГО ГРАФАНА

**Усманов Р. И., Колесников А. И., Кузовников М. А., Кулаков В. И..... 143**

КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ВЫСШЕГО БОРИДА ВОЛЬФРАМА  $\text{WB}_{5-x}$ : СИНТЕЗ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ

**Филоненко В.П., Бугаков В.И., Зибров И.П, Анохин А.С..... 145**

УЛЬТРАЗВУКОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ ПРОПИЛЕНГЛИКОЛЯ ПРИ ДАВЛЕНИЯХ ДО 1.4ГПа

**Фомин Ю. Д., Данилов И.В., Громницкая Е.Л. .... 147**

ОРБИТАЛЬНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ И ПОЛЯРОННЫЙ ХОПИНГ В ШПИНЕЛЯХ  $\text{Fe}\cdot\text{Fe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$

**Фоминых Н. А., Стегайлов В.В..... 148**

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР В СИСТЕМЕ Al-Cu С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОТЕНЦИАЛОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

**Хазиева Е.О., Щелкачев Н.М., Рыльцев Р.Е..... 149**

ПЕРИОДИЧНОСТЬ АНОМАЛЬНОГО ПОВЕДЕНИЯ ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЫ С ПОТЕНЦИАЛОМ ГЕРЦА

**Гайдук Е. А., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н., Бобков С. А., Рыжов В. Н. 151**

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В ДОПИРОВАННЫХ СЛОИСТЫХ НИКЕЛАТАХ  $R\text{NiO}_2$  ПОД ДАВЛЕНИЕМ

**Шиленко Д.А., Леонов И.В. .... 153**

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИИ  
КОЛЛОИДНЫХ СИСТЕМ В ТРЕХМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

**Широкова А.А., Кохановская А.В., Забавина П.А.,  
Бондарева А.А., Симкин И.В., Либет П.А., Яковлев Е.В. ....** 155

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ АМОРФНЫХ ЛЬДОВ:  
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

**А. А. Шуплецова, В. В. Стегайлов.....** 157

ФРУСТРИРОВАННЫЕ СВОЙСТВА РАЗБАВЛЕННОГО  
ИЗИНГОВСКОГО МАГНЕТИКА

**Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д.....** 158



# АНИЗОТРОПНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЭКСИТОНОВ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ ИЗ ХАЛЬКОГЕНИДОВ СВИНЦА

Авдеев И. Д.<sup>1,\*</sup>, Нестоклон М. О.<sup>1</sup>, Гупалов С. В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 26*

<sup>2</sup>*Jackson State University, Jackson, Mississippi, USA*

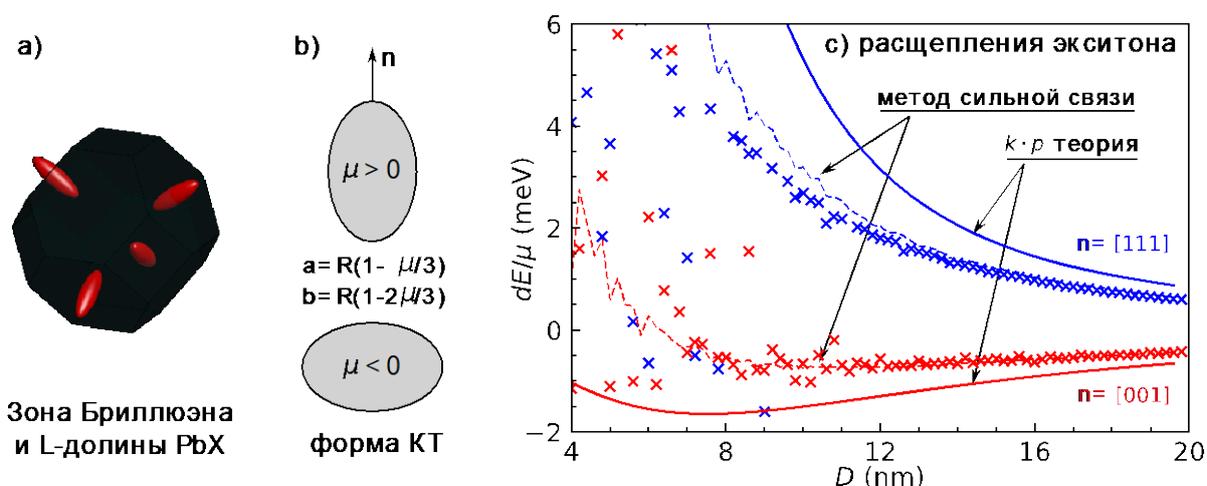
*ivan.avdeev@mail.ioffe.ru*

Квантовые точки из халькогенидов свинца  $PbX$ ,  $X=S, Se$  являются перспективными материалами для инфракрасной оптоэлектроники [1]. Халькогениды свинца — это многодолинные полупроводники с узкой шириной запрещенной зоны, кубической симметрией и экстремумами зон расположенными в четырех анизотропных  $L$  долинах (см. рисунок). За счет большого экситонного радиуса и легких масс носителей в них сильно выражены эффекты размерного квантования [2], что позволяет эффективно перестраивать ширину запрещенной зоны квантовых точек меняя их размер. Однако, с уменьшением размера, в них начинает проявляться тонкая структура экситона [3], которая обусловлена долинным смешиванием и обменным кулоновским взаимодействием электронов и дырок [4]. В эксперименте [5] наблюдались также небольшие ( $\sim 1$  мэВ) анизотропные расщепления экситона, которые были связаны с возможным наличием поверхностных дефектов и на сегодняшний день изучены не до конца.

В этой работе нами исследован механизм расщепления экситона в квантовых точках из  $PbX$  за счет анизотропии формы. Без учета долинного расщепления структура гамильтониана обменного взаимодействия приводит к тому, что оптически активным в них является только один, сверхъяркий, триплет, соответствующий симметричной комбинации долинных состояний [4]. Нами построена аналитическая модель его анизотропного расщепления в квантовых точках с формой эллипсоида вращения (см. рисунок). Модель аккуратно учитывает комбинации долинных состояний и анизотропию массы в  $L$  долинах. В рамках приближения изотропных долин нами получена упрощенная, линейная по параметру анизотропии  $\mu$  (см. рисунок) формула для случая, когда ось эллипсоида направлена вдоль оси  $[001]$ , одинаково наклоненной ко всем  $L$  долинам.

Также нами проведено моделирование анизотропных расщеплений экситона в сфероидальных квантовых точках из  $PbX$

методом сильной связи [6]. Метод сильной связи, в отличие от *k*-*p*, учитывает долинное смешивание и, как следствие, долинное расщепление электронных и дырочных состояний, которое приводит к просветлению других экситонных триплетов [4] и их анизотропным расщеплениям. В результате анизотропное расщепление экситонных триплетов, особенно для маленьких квантовых точек, во многом определяется долинным расщеплением — сильно осциллирующей с размером квантовой точки величиной. При больших размерах, когда основной вклад в формирование тонкой структуры экситона вносит обменное взаимодействие, анизотропное расщепление сверхъяркого



триплета в сфероидальных квантовых точках совпадает с суммарным расщеплением экситона и хорошо согласуется с теорией.

Результаты расчета анизотропных расщеплений экситона в квантовых точках из PbS приведены на рисунке. Сплошными линиями показан расчет суммарных анизотропных расщеплений экситона в рамках анизотропной *k*-*p* модели, прерывистыми — расчет методом сильной связи. Символами «x» показан расчет расщеплений сверхъяркого триплета с учетом долинного смешивания. Величина анизотропных расщеплений при небольшой анизотропии формы составляет ~1 мэВ, что согласуется с экспериментом [5].

Исследование выполнено за счет гранта РФФ №22-72-00121.

### Литература

1. L. Gao et al., Nat. Photon. **14**, 4, 227, **2020**,
2. I. Kang, F.W. Wise, J. Opt. Soc. Am. B **14**, 7, 1632, **1997**,
3. Z. Hu et al, Nano Lett. **19**, 12, 8519, **2019**,
4. IDA, MON, SVG, Nano Lett. **20**, 12, 8897, **2020**,
5. Y. Kim et al., Small **17**, 13, 2006977, **2021**,
6. A.N. Poddubny, MON, SVG, Phys. Rev. B **86**, 3 035324, **2012**.

# 3D ( $H$ - $\theta$ - $\varphi$ ) ДИАГРАММА РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ $\text{CeV}_6$ С СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

Азаревич А.Н.<sup>1</sup>, Богач А.В.<sup>1</sup>, Демишев С.В.<sup>1</sup>, Краснорусский В.Н.<sup>2,1</sup>,  
Шицевалова Н.Ю.<sup>3</sup>, Половец С.Е.<sup>3</sup>, Филипов В.Б.<sup>3</sup>, Воронов В.В.<sup>1</sup>,  
Случанко Н.Е.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва,  
Россия*

<sup>2</sup>*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,  
Троицк, Россия*

<sup>3</sup>*Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича  
НАНУ, Киев, Украина  
E-mail: azarevich@lt.gpi.ru*

Принято считать, что  $\text{CeV}_6$  с простой кубической кристаллической структурой является классическим примером Кондо-решетки с малой температурой Кондо ( $T_K \approx 1-2$  К), сравнимой с температурами двух магнитных фазовых переходов при  $T_Q \approx 3,2$  К (орбитальное упорядочение в антиферроквадрупольной (АФК) фазе) и при температуре Нееля  $T_N \approx 2,3$  К (антиферромагнитное (АФМ) состояние) [1-2]. Ранее в [1] было установлено, что при гелиевых температурах в АФК состоянии  $\text{CeV}_6$  наблюдается электронный нематический эффект, что свидетельствует о нарушении кубической симметрии в этом гексабориде. В [3-4] было показано, что при описании магнитного основного состояния  $\text{CeV}_6$  необходимо учитывать формирование кластеров Се наноразмера, причем, по мнению авторов [4], анизотропия магнитной фазовой диаграммы в этом соединении с сильными электронными корреляциями обусловлена формированием пар Се-Се. Поскольку парные электронные корреляции и другие многочастичные эффекты в значительной мере определяют особенности зарядового транспорта в АФ фазе  $\text{CeV}_6$ , представляет интерес исследовать анизотропию магнетосопротивления при изменении направления и напряженности внешнего магнитного поля в различных плоскостях  $H//(100)$ ,  $H//(110)$  и  $H//(111)$  и восстановить 3D ( $H$ - $\theta$ - $\varphi$ ) диаграмму рассеяния, сравнив ее с полученной ранее по результатам измерений намагниченности 3D магнитной фазовой диаграммой.

В связи с этим, целью настоящей работы явилось проведение прецизионных исследований магнетосопротивления  $\Delta\rho/\rho(H, \varphi, \theta)$  при температуре  $T=1.9$  К в полях до 80 кЭ и построение 3D диаграммы рассеяния для выяснения режимов зарядового транспорта в различных магнитоупорядоченных фазах  $\text{CeV}_6$ . Для примера на рис.1 в полярных координатах представлено поведение магнетосопротивления  $\Delta\rho/\rho(H, \varphi)$  при изменении направления вектора  $\mathbf{H}$  в плоскости (110) (панель а) в сопоставлении в магнитной фазовой  $H$ - $\varphi$  диаграммой (панель б). Выполненный в работе анализ результатов транспортных измерений в  $\text{CeV}_6$  позволяет установить режимы рассеяния носителей заряда в фазах I-III и связать их с многочастичными состояниями различной природы.

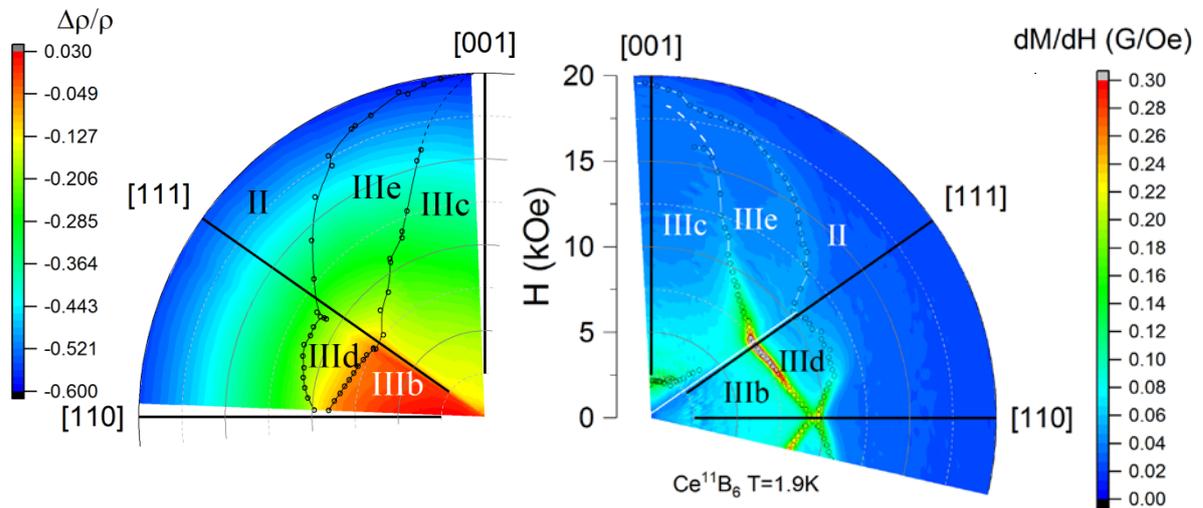


Рис.1 (а) Магнетосопротивление  $\Delta\rho/\rho$   $\text{CeV}_6$  в плоскости (110) и (б) магнитная фазовая  $H$ - $\varphi$  диаграмма при  $T=1.9$  К в полях до 20 кЭ, восстановленная из анализа производной намагниченности  $dM/dH(H, \varphi)$ . Цветом показаны амплитуды эффектов. Римскими цифрами обозначены магнитные фазы: II – АФК, III – АФМ.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№23-22-00297).

#### Литература

1. S. V. Demishev *et al.*, Sci. Rep. **7**, 17430, **2017**
2. A. S. Cameron *et al.*, Rep. Progr. Phys. **79**, 066502, **2016**
3. A. Bogach *et al.*, Acta Phys. Pol. A **137**, 782, **2020**
4. D. N. Inosov *et al.*, Phys. Rev. B **103**, 214415, **2021**

## **ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОРИСТЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ TiNi**

Аникеев С.Г., Кафтаранова М.И., Ходоренко В.Н., Артюхова Н.В.  
*Томский государственный университет, Томск, Россия*  
*anikeev\_sergey@mail.ru*

К используемым в медицине имплантационным TiNi сплавам предъявляют ряд требований. Они должны быть биосовместимы с тканями организма, не вызывать воспалительных реакций, обладать оптимальными физико-механическими характеристиками, соответствующими назначению материала. К числу факторов, влияющих на изменение физико-механических свойств имплантируемых материалов, относятся технология получения полуфабрикатов, концентрации Ni, Ti и легирующих элементов, а также микроструктурные особенности поверхности имплантируемых конструкций. Важным условием любого усовершенствования TiNi материала является сохранение зависимости между величиной напряжения и деформацией, соответствующей тканям в условиях нагрузки и разгрузки, а именно гистерезисная зависимость, которая выражается в возврате деформации и восстановлении исходной формы при снятии нагрузки. Одним из способов оптимизации поверхности, который позволяет создавать микропористую поверхность стенок пор необходимую для интеграции ткани внутрь пористого TiNi является химическое травление [1]. В связи с этим исследование влияния способа модификации поверхности путем химического травления на физико-механические свойства пористых СВС сплавов является актуальной задачей.

Пористые СВС-материалы на основе TiNi получали при  $T=400$  °С. Порошки Ti и Ni сушили в вакуумном шкафу при  $T=60-70$  °С в течение 7 ч, затем бч смешивали в смесители. Порошковую шихту засыпали в кварцевую колбу, уплотняли до пористости 45-50%. Колбу устанавливали в реактор, нагревали до 400° С, инициировали СВ-синтез. Далее сплав обрабатывали в растворах кислот: №1-HF (2 %) в течение 5 мин при  $T=20$  °С, №2 - HF + HNO<sub>3</sub> (1:3) в течение 2 сек при  $T=80$  °С. Исследование прочностных и пластических свойств выполняли на установке Instron 3369 в условиях растяжения. Размер исследуемых образцов составлял  $50 \times 7 \times 1,5$  мм<sup>3</sup>.

После вытравливания составом №1 крупных частиц  $Ti_2Ni$ ,  $Ti_4Ni_2(O,C)$ , предел прочности при растяжении увеличился от 120 до 155 МПа. Максимальная накопленная деформация возрастает от 4 до 6,4 %. При этом максимальная накопленная деформация для сплавов, обработанных составом №2, составляет 5,3 %. Это объясняется тем, что частицы, обогащенные по титану, вытравливаются менее интенсивно, по сравнению с обработкой составом №1. В пористых сплавах, обработанных составом №2, остается большое количество частиц, обогащенных по титану, они являются некогерентными, крупными по размеру, хрупкими. При деформации трещины распространяются именно по этим частицам, снижая уровень пластической деформации, при этом предел прочности остается практически неизменным порядка 128 МПа.

Исследование выполнено при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет 2030).

#### Литература

1. В.Э. Гюнтер, Г.Ц. Дамбаев, П.Г. и др. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы, Том. ун-та, **1998**.

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ СТЕКЛОВАНИЯ С ПОМОЩЬЮ РАСШИРЕННОГО МЕТОДА ФАЗОВОГО ПОЛЯ**

Анкудинов В. Е., Васин М. Г.

*Институт физики высоких давлений  
им. Л.Ф. Верецагина РАН, Москва  
vladimir@ankudinov.org*

В работе представлена математическая модель, описывающая переход вещества из жидкого состояния в твердое в процессе его равномерного охлаждения. Модель основана на калибровочной теории стеклования [1], расширенной с помощью метода фазового поля [2]. Выполнен численный расчёт системы стохастических дифференциальных уравнений, учитывающих тепловые флуктуации. С помощью предложенной модели описана конкуренция между процессами кристаллизации и стеклования, протекающими при охлаждении жидкости с разной скоростью. Предложен параметр порядка  $(\nabla \times A)$ , где  $A$  – поле, описывающее упорядочение дальнего

порядка (калибровочное поле). Данный параметр порядка характеризует степень перехода вещества в стекольное состояние, исследована область его применимости, а также получены кривые, описывающие динамику формирования аморфной или кристаллической фаз. Показано, что при высокой скорости охлаждения модель замерзает в состоянии с аморфной структурой [Рис.1(a)]. Уменьшение скорости охлаждения приводит к формированию поликристаллической структуры [Рис.1(b)], либо упорядоченной структуры с дефектами [Рис.1(c)].

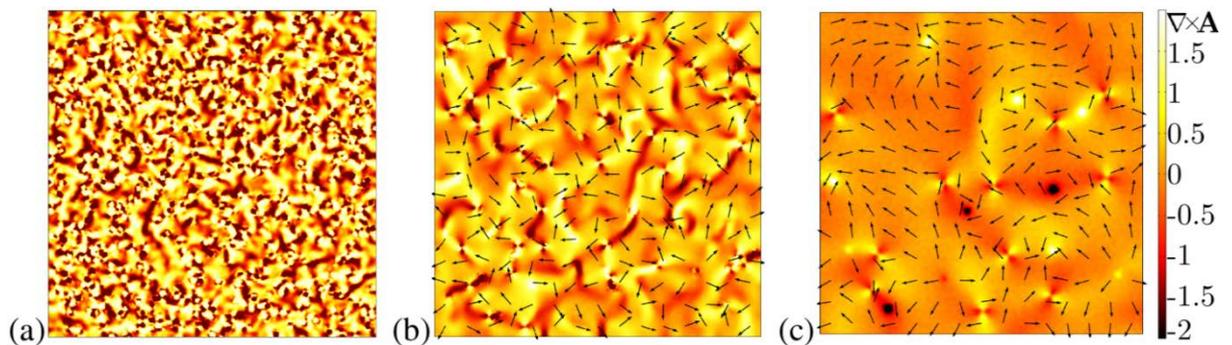


Рис. 1. Снимки мгновенного распределения параметра порядка ( $\nabla \times \mathbf{A}$ ) [обозначено цветовым градиентом] для трех различных скоростей охлаждения  $V_{cool}$  в двухмерной расчетной области  $100 \times 100$ : (a)  $V_{cool} = 20e-4$  безразмерных единиц [K/s], время фиксации  $t = 5000$  [s]; (b)  $V_{cool} = 2e-4$  [K/s],  $t = 7500$  [s]; (c)  $V_{cool} = 0.25e-4$  [K/s],  $t = 28000$  [s]. На панелях (b), (c) также приведено поле  $\mathbf{A}$  в виде стрелок, также указывающее на распределение напряжений в домене.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №23-22-00168, <https://rscf.ru/project/23-22-00168/>

#### Литература

1. M.G.Vasin, Phys. Rev. E **106**, 044124 (2022).
2. N. Provatas, K. Elder, Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering, 312 с., **2010**

## СПОСОБ ГОРЯЧЕГО ГАЗОСТАТИЧЕСКОГО ПРЕССОВАНИЯ

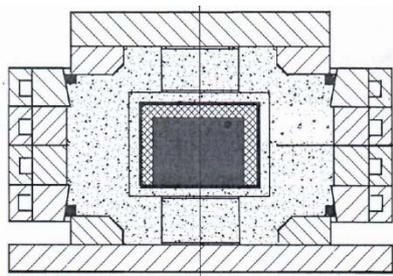
Антанович А.А.

*ФГБУН Институт физики высоких давлений имени Л.Ф. Верещагина  
Российской академии наук, Москва, Россия*

*antanov@hppi.troitsk.ru*

Горячее изостатическое прессование, заключающееся в обработке материалов высокими давлениями при высоких температурах, широко используют для обработки металлических и керамических порошковых изделий, а также для пропитки пористых материалов расплавленными веществами, например, легкоплавкими металлами. При этом обрабатываемые заготовки материала обычно помещают в тонкостенные металлически контейнеры, равномерно передающие давление на поверхность заготовок. В качестве среды, передающей давление, в основном используют газообразные аргон или азот. Основными недостатками устройств для газостатического прессования являются взрывоопасность, сложности в обеспечении теплозащиты стенок сосуда высокого давления, а также в решении задач сложного теплообмена.

С другой стороны, для пропитки углеродных каркасов каменноугольным пеком с последующей карбонизацией в технологии производства углерод-углеродных композиционных материалов мы



применяем показанный на рисунке взрывобезопасный аппарат высокого давления типа «цилиндр-поршень» двухстороннего сжатия, в котором средой, передающей давления служит сухой кварцевый песок. Песок также обладает достаточно низкой теплопроводностью и служит хорошей теплозащитой внутренних поверхностей аппарата. Кроме того, для усиления теплозащиты в стенках аппарата предусмотрена система водяного охлаждения. Такой аппарат может также успешно применяться и для пропитки пористых каркасов жидкими веществами (например, графита расплавленными металлами) под давлением, так как пористый каркас в герметичном контейнере будет находиться в условиях полной гидростатики. Однако при прессовании порошковых изделий боковое давление песка в таком аппарате будет составлять  $\sim 0,6$  от осевого давления, что не может не сказаться на качестве прессовки.

Для снижения взрывоопасности газостатических установок высокого давления, упрощение системы теплозащиты стенок и улучшения теплообмена предлагается устройство высокого давления, сочетающее в себе элементы конструкций газостата и нашего аппарата высокого давления. Основная особенность предлагаемого газостатического устройства заключается в том, что весь его внутренний объем заполнен кварцевым песком или иным сыпучим материалом. Пористость песка составляет 37-47% в зависимости от крупности и преимущественной формы зерен. Это позволяет более, чем в два раза снизить необходимое количество газа высокого давления и, соответственно, степень взрывоопасности.

Заполнение свободного внутреннего объема устройства песком позволяет подавить конвективный и радиационный теплообмен и обеспечить теплозащиту силовой части устройства. Например, при нагреве контейнера диаметром 40 мм и высотой 30 мм, содержащего заготовку графита и навеску алюминиевого сплава, в аппарате высокого давления с внутренним диаметром 150 мм до температуры 750°C в течение 50 минут с последующей выдержкой при этой температуре в течение 10 минут силовой корпус нагрелся всего ~ на 50 градусов.

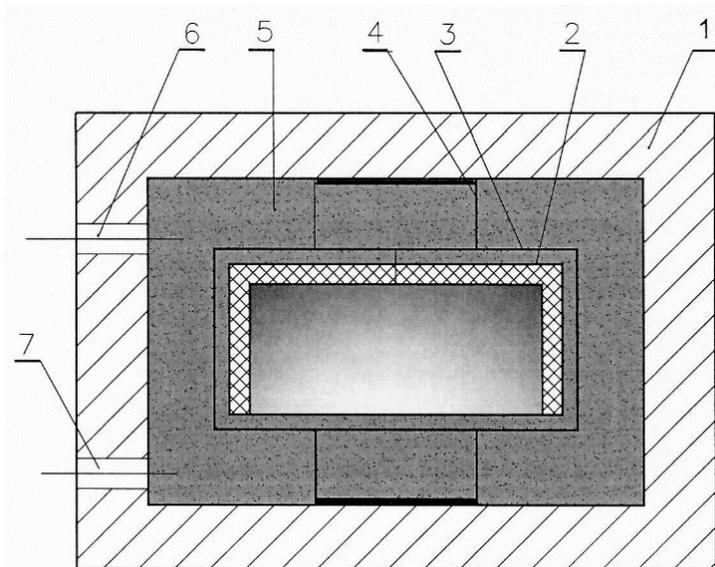


Схема предлагаемого аппарата высокого давления  
1 – силовой корпус, 2 – контейнер с заготовкой, 3 – нагреватель,  
4 – токоподвод, 5 – песок, 6 – к вакуумному насосу,  
7 – к газовому компрессору

# ОБРАТНЫЙ ИЗОТОПНЫЙ ЭФФЕКТ В СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ГИДРИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Антонов В. Е.

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

*antonov@issp.ac.ru*

Высокотемпературная сверхпроводимость «супергидридов» металлов с атомным отношением  $H/Me \geq 6$ , синтезированных при высоких давлениях водорода в последние годы, хорошо описывается теорией БКШ и, в частности, характеризуется нормальным изотопным эффектом: температура  $T_c$  сверхпроводящего перехода понижается при замене протия на дейтерий с большей атомной массой. У четырех сверхпроводящих гидридов с  $H/Me \leq 15/4$ , исследованных ранее, изотопный эффект был либо обратным (у гидридов PdH [1], TiH<sub>0.71</sub> [2] и MoH<sub>1.2</sub> [3]), либо отсутствовал (у гидрида Th<sub>4</sub>H<sub>15</sub> [4]). В предлагаемом докладе представлен обзор попыток выяснить причину этого явления.

В результате примерно сорокалетнего экспериментального и теоретического исследования утвердилось мнение, что обратный изотопный эффект в системе Pd–H/D обусловлен взаимодействием электронов с сильно ангармоническими оптическими колебаниями атомов водорода/дейтерия, и наиболее ярким проявлением ангармонизма считалось значительное отличие отношения оптических частот  $\omega_H/\omega_D \approx 1.5$  в гидриде и дейтериде от гармонического значения  $\sqrt{2}$  (см., например, работу [5]). Это мнение, однако, оказалось несостоятельным, поскольку оптические спектры PdH и PdD, исследованные методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН), продемонстрировали почти гармоническое поведение, а причиной отличия отношения частот  $\omega_H/\omega_D$  от  $\sqrt{2}$  было различие в силовых константах взаимодействия Pd–H и Pd–D [6,7].

Оптические спектры гидрида и дейтерида молибдена с  $H(D)/Mo \approx 1.1$  также были исследованы методом НРН и также оказались почти гармоническими, а отношение  $\omega_H/\omega_D \approx 1.44$  мало отличалось от  $\sqrt{2}$  [8]. Имеющиеся расчеты *ab initio* для моногидрида и монодейтерида молибдена дали неправильный знак изотопного эффекта – были получены, соответственно,  $T_c = 3.675$  и  $3.522$  К [9] вместо экспериментальных значений  $T_c = 0.92$  и  $1.11$  К [3]).

НРН исследования, таким образом, показали, что ни сильный ангармонизм решеточных колебаний, ни сильное отклонение отношения  $\omega_H/\omega_D$  от гармонического значения не являются необходимыми условиями существования обратного изотопного эффекта. Возникал закономерный вопрос – является или нет этот эффект общим свойством всех сверхпроводящих гидридов с не очень высокими (по нынешним меркам) значениями  $H/Me \leq 15/4 = 3.75$ ? Выяснилось, что не является – у ГПУ тригидрида циркония, недавно синтезированного при давлении 9 ГПа, изотопный эффект оказался нормальным:  $ZrH_3$  и  $ZrD_3$  имели  $T_c = 11.6$  и  $9.5$  К [10] в прекрасном согласии со значениями  $T_c = 11.7$  и  $9.21$  К, рассчитанными ранее [11] в предположении, что это соединение – сверхпроводник с обычным БКШ механизмом спаривания электронов.

Оставалась еще возможность, что у гидридов с обратным изотопным эффектом имеются особенности в акустических колебаниях кристаллической решетки – эта низкоэнергетическая часть фононного спектра ни у одного из них ранее экспериментально не изучалась. Результаты наших недавних измерений теплоемкости  $PdH$  и  $PdD$  в интервале температур 130–200 К, где вклады от акустических и оптических колебаний имеют сравнимую величину, оказались, однако, в хорошем согласии с результатами расчета [7] в гармоническом приближении.

Таким образом, происхождение обратного изотопного эффекта в сверхпроводимости гидридов пока остается загадкой.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 23-22-00361.

## Литература

1. B. Stritzker, W. Buckel, Z. Phys. **257**, 1, **1972**
2. A. I. Kolesnikov et al., J. Phys.: Condens. Matter **5**, 5045, **1993**
3. В. Е. Антонов и др., ФТТ **30**, 598, **1988**
4. C. B. Satterthwaite, I. L. Toepke, Phys. Rev. Lett. **25**, 741, **1970**
5. I. Errea et al., Phys. Rev. Lett. **111**, 177002, **2013**
6. V. E. Antonov et al., Phys. Rev. B **80**, 134302, **2009**
7. V. E. Antonov et al., J. Alloys Compnd. **905**, 164208, **2022**
8. M. A. Kuzovnikov et al., J. Alloys Compnd. **893**, 162299, **2022**
9. Z. Liao et al., J. Appl. Phys. **128**, 105901, **2020**
10. M. A. Kuzovnikov et al., Phys. Rev. Materials **7**, 024803, **2023**
11. Z.-Z. Han et al., Comput. Mater. Sci. **134**, 38, **2017**

## ПРОНИЦАЕМОСТЬ ПОРИСТОГО СПЛАВА НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ СВС

Артюхова Н.В., Аникеев С.Г., Ходоренко В.Н., Кафтаранова М.И.,  
Пахолкина С.А.

*Томский государственный университет, Томск, Россия*  
*artyukhova\_nad@mail.ru*

Сплавы на основе TiNi за счет протекающих в их структуре мартенситных превращений обладают эффектом памяти формы и сверхэластичности. Пористые сплавы имеют развитую объемную структуру порового пространства. Значимой характеристикой пористой структуры является ее проницаемость, поскольку имплантат после интеграции в живые ткани контактирует с биологическими жидкостями, циркулирующими через пористую матрицу. Причем расход жидкости зависит от многих факторов, включая ее вязкость, а также структурные особенности порового пространства и межпоровых перемычек. Целью данной работы является исследование влияния структурных особенностей пористого СВС материала на основе TiNi на характеристики проницаемости.

Получение пористого материалов на основе TiNi проводили методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) в трубчатой электрической печи типа СУОЛ в атмосфере инертного газа аргона из порошков титана и никеля марок ПТОМ и ПНК-ОТ4, соответственно. Синтез проводили в кварцевой трубке диаметром 50 мм. Порошковую шихту уплотняли до пористости 45–50 % и нагревали до 300 °С. Для расчета характеристики проницаемости использовали формулу Дарси [1]. Коэффициент проницаемости был определен в трех перпендикулярных направлениях:  $K_{\text{прод1}}$ ,  $K_{\text{прод2}}$ ,  $K_{\text{попер}}$ . Структурные особенности полученных материалов исследовали методами оптической и растровой электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа.

Полученный в работе крупнопористый СВС материал имеет средний размером пор 171 мкм и пористость 64%. Поровое пространство СВС-материала характеризуется сложной структурой взаимосвязанных пор. Данная структура обусловлена послойным режимом синтеза, продуктом которого является пористо-проницаемый материал с высокой долей открытых пор. Наблюдается яркая анизотропия строения порового пространства СВС-материала. Значения коэффициента проницаемости:  $K_{\text{прод1}}=588\text{Д}$  (стандартное отклонение  $\sigma=8\text{Д}$ ),  $K_{\text{прод2}}=793\text{Д}$  ( $\sigma=16\text{Д}$ ),  $K_{\text{попер}}=254\text{Д}$  ( $\sigma=9\text{Д}$ ).

Исследование выполнено при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет 2030).

#### Литература

1. Н.Е. Леонтьев Основы теории фильтрации: учебное пособие. 2-е изд. / Н. Е. Леонтьев. – Москва: МАКС Пресс, 2017. 88с.

### **АДАМАНТАН В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ: КАРБОНОГИЗАЦИЯ, ГРАФИТИЗАЦИЯ, АЛМАЗООБРАЗОВАНИЕ**

Баграмов Р.Х.

*Институт физики высоких давлений имени Л.Ф. Верещагина РАН  
bagramov@hppi.troitsk.ru.*

Нынешний год – год семидесятилетия первого синтеза алмаза, однако механизмы этого процесса до сих пор остаются предметом исследований и дискуссий. Достаточно хорошо работающие теории и модели позволяют синтезировать алмазы и алмазные материалы с использованием высоких статических и динамических давлений, химических реакций и осаждения из газовой фазы, а также других методов. Тем не менее, предсказательная сила имеющихся моделей недостаточна. Поэтому развитие методов синтеза алмазов с использованием углеводородов в условиях статических высоких давлений (НРНТ) происходит в основном экспериментально [1, 2].

Путь превращения углеводорода в алмаз удобно разбить на отдельные этапы, включая карбонизацию, графитизацию и алмазообразование. Кроме того, необходимо рассматривать сопутствующие процессы, такие, как дегидрирование, транспортные реакции, перестройку решетки, диффузию и другие. Это позволяет изучать их относительно обособленно и, в том числе, с помощью модельных экспериментов.

В настоящей работе адамантан ( $C_{10}H_{16}$ ), так называемый каркасный углеводород, использовался с одной стороны как модельное вещество, а с другой – как одно из наиболее перспективных для НРНТ синтеза наноалмазов. Приводятся экспериментальные результаты, демонстрирующие влияние на этапы превращения термодинамических параметров Р-Т (давление и температура), а также неуглеродной составляющей среды синтеза –

водорода. Изучалось также влияние таких гетероатомов, как бор и галогены.

Показано, что при 12 ГПа и 1300°C алмазы образуются из адамантана прямым переходом. По-видимому, высокие P-T параметры исключают образование графита, а большое пересыщение приводит к массовой нуклеации, и, как следствие, алмазы имеют наноразмер. Установлено сильное гидрирование их поверхности. Это объясняет то, что алмазные зерна не срастаются.

Показано, что чистый адамантан ( $C_{10}H_{16}$ ) при давлении 2.0÷7.0 ГПа при 1400°C образует графит высокого структурного совершенства. Аморфные исходные углероды при таких же параметрах остаются аморфными. Таким образом, графитизация происходит только в присутствии водорода.

Из смеси графита и адамантана синтез алмаза проходил практически со 100% выходом при давлениях около 8 ГПа и температурах порядка 1500-1600°C. Это свидетельствует о том, что присутствие водорода снижает необходимые P-T параметры относительно прямого перехода, а графит, по-видимому, в данной системе – «промежуточная» фаза перед синтезом алмаза. Таким образом, влияя на стадию графитообразования, можно влиять на синтез алмаза.

Экспериментально показано, что галогены значительно тормозят графитизацию исходных углеводородов в условиях высоких давлений. Показано, что добавление галогенов к исходному адамантану позволяет получать наноалмазы. Это, по-видимому, связано с заторможенностью стадии графитизации относительно нуклеации алмаза.

Показано, что бор, известный как ускоритель графитизации, также позволяет снижать P-T параметры синтеза алмаза даже в отсутствие водорода. Полученные в системе адамантан+бор алмазы за времена порядка секунд были микронного размера. Кроме того, микронные кристаллы были получены «прямым» превращением борированного графита в алмаз. Это говорит, о том, что бор, по-видимому, содействует переходу графит-алмаз на стадии графитизации. За веществами, снижающими параметры синтеза алмаза, закрепился термин «катализаторы».

#### Литература

1. V. A. Davydov, V. Agafonov, V. Khabashesku. J. Phys. C. C, 120 (2016) 29498–29509.
2. E. A. Ekimov, M. V. Kondrin. Semiconductors and Semimetals. 103 (2020) 161-199.

## ТЕМПЕРАТУРНОЕ И КОНЦЕНТРАЦИОННОЕ ИЗМЕНЕНИЕ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВОВ Al-Zn

Баталова Е. А., Камаева Л. В.

*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,  
Россия, 426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34  
elizaveta.smagina.97@mail.ru*

В последние годы сплавы на основе системы Al-Zn все чаще используются в различных отраслях промышленности. Это связано с их отличными литейными свойствами и низкой температурой плавления. Одним из перспективных направлений использования сплавов Al-Zn является возможность разработки припоев на их основе. В основном эти сплавы используются в литом состоянии, что позволяет избежать появления трещин при холодной обработке. Известно, что при процессах перехода из жидкого состояния в твердое, на формирование структуры сплава не мало важное влияние оказывает состояние исходного расплава. Качественно оценить изменение межатомного взаимодействия при изменении концентрации атомов в металлическом расплаве можно при помощи анализа структурно – чувствительных свойств. Одним из таких свойств является вязкость, которая, кроме того, характеризует литейные свойства расплава. Однако экспериментального материала, касающегося вязкости расплавов Al-Zn, на сегодняшний день недостаточно, особенно в области составов, богатых цинком.

Поэтому в данной работе нами были проведены экспериментальные исследования температурного и концентрационного поведения вязкости расплавов Al-Zn с содержанием цинка от 2,5 до 97,5 ат.% от температуры плавления до 800°C.

Кинематическая вязкость ( $\nu$ ) расплавов Al-Zn измерялась методом затухающих крутильных колебаний тигля с расплавом в варианте Швидковского. Эксперименты проводили на автоматизированной установке, в атмосфере He. При нагреве образцов в жидком состоянии наблюдалось интенсивное испарение Zn. Для образцов Al-Zn с содержанием цинка до 25 ат.% установлено, что при полном цикле экспериментов потери концентрации Zn не превышают 1%. В области, богатой Zn, изменения состава расплава в ходе высокотемпературного эксперимента также находятся в пределах 1-1,5 ат.%, однако потеря массы образца при этом

составляет до 15%, что приводит к значительному отличию декремента затухания. В результате, если не учитывать потерю массы при расчете вязкости, то за счет изменения декремента общая ошибка определения вязкости составляет 9%. При такой ошибке полученные политермы вязкости в прямых и полулогарифмических координатах не имеют ярко-выраженных особенностей и хорошо описываются уравнением Аррениуса в исследуемом интервале температур.

По полученным температурным зависимостям вязкости были построены ее концентрационные зависимости при различных температурах. По мере замещения атомов алюминия атомами цинка наблюдается уменьшение вязкости расплавов Al-Zn. Это изменение концентрационного поведения вязкости носит немонотонный характер. При содержании цинка до 20 ат.% вязкость исследуемых расплавов меняется слабо, затем происходит ее резкое уменьшение с последующим увеличением до 35 ат. % цинка. В результате в области 20 ат.% Zn наблюдается ярко-выраженный минимум. В области концентраций от 35 до 80 ат.% Zn вязкость расплавов немонотонно уменьшается, после чего происходит ее увеличение, сопровождающееся локальным минимумом при эвтектической концентрации (87,5 ат.% Zn). Особенность, обнаруженная в области, богатой алюминием, соответствует предельной растворимости цинка в низкотемпературной  $\alpha$ -фазе.

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

## **СТРУКТУРА МЯГКИХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОД В АМОРФНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ**

*Конюх Д. А., Бельтюков Я. М.  
ФТИ им. А.Ф. Иоффе  
[ybeltukov@gmail.com](mailto:ybeltukov@gmail.com)*

Аморфные твердые тела отличаются от кристаллических неупорядоченным расположением атомов, что приводит к ряду существенных отличий в их свойствах. В частности, температурная зависимость теплопроводности аморфных твердых тел существенно отличается от такой зависимости в кристаллах. При этом разница в теплопроводности может достигать 4 порядков по величине [1]. Теплопроводность аморфных диэлектриков и полупроводников

определяется переносом энергии за счет распространения колебательных возбуждений.

Структура и транспортные свойства колебательных возбуждений в аморфных телах является предметом активного исследования в настоящее время [2, 3]. В частности, интерес представляет частотный диапазон около 1 ТГц, в котором имеются так называемые квазилокальные колебания, которые определяют основной вклад в рассеяние акустических фононов и дают существенный вклад в бозонный пик [1]. Квазилокальные колебания являются долгоживущими колебаниями небольших групп атомов, слабо связанных со своим окружением. Исследование природы квазилокальных колебаний является важной и трудной задачей, осложненной рядом факторов, в первую очередь, их специфической статистикой. Как правило, количество квазилокальных колебаний в стеклах зависит от процессов охлаждения, влияющих на образование в структуре стекол аномально мягких участков [2]. Каждый мягкий участок имеет свою характерную частоту, что ведет к распределению частот квазилокальных колебаний. При этом охлажденная система приходит к метастабильному положению равновесия, которое обладает существенной корреляцией упругих констант связей. В связи с этим, изучение влияния структурного коррелированного беспорядка на квазилокальные колебания позволит расширить представление о микроскопических свойствах низкочастотных колебаний в аморфных материалах.

Для изучения поставленного вопроса была применена теория коррелированных случайных матриц, показавшая свою эффективность для описания критерия Иоффе-Регеля и других наиболее общих колебательных свойств аморфных твердых тел [4, 5]. Колебания вблизи устойчивого положения неупорядоченной системы описываются случайной динамической матрицей  $M$ , и в случае сильного беспорядка, присущего аморфным телам, статистические свойства динамической матрицы наилучшим образом описываются модифицированным ансамблем Вишарта  $M = AA^T - BB^T$ . Матрица  $A$  определяет основной вклад в динамическую матрицу  $M$ , который определяет устойчивость системы. Однако реальные аморфные тела находятся в метастабильном состоянии, что приводит к наличию второго вклада, который описывается матрицей  $B$  и стремится сделать систему менее устойчивой. Мы показали, что в такой модели вблизи порога устойчивости возникают мягкие квазилокальные колебания, статистика которых соответствует результатам молекулярно-

динамических расчетов реальных систем. Изучение структуры квазилокальных колебаний показало, что они состоят из ядра, которое описывается уравнением диффузии, и оболочки, которая спадает степенным образом и описывается упругим диполем.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 22-72-10083.

#### Литература

1. U. Buchenau et al.. Phys. Rev. B **46**, 2798, **1992**
2. C. Rainone, E. Bouchbinder, E. Lerner, PNAS **117**, 5228, **2020**
3. Y. C. Hu, H. Tanaka. Nature Physics **18**, 669, **2022**
4. Y. M. Beltukov, V. I. Kozub, D. A. Parshin, Phys. Rev. B **87**, 134203, **2013**
5. D. A. Conyuh, Y. M. Beltukov. Phys. Rev. B **103**, 104204, **2021**

### **ПОВЕРХНОСТНАЯ И АНИЗОТРОПНАЯ ОБЪЕМНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В $ZrB_{12}$ СО СТРУКТУРНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ**

Богач А.В.<sup>1</sup>, Азаревич А.Н.<sup>1</sup>, Демишев С.В.<sup>1</sup>, Воронов В.В.<sup>1</sup>,  
Шицевалова Н.Ю.<sup>2</sup>, Филипов В.Б.<sup>2</sup>, Случанко Н.Е.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Институт проблем материаловедения им. И.Н.Францевича НАНУ,  
Киев, Украина*

*E-mail: alex@lt.gpi.ru*

Недавно было установлено, что в сверхпроводнике  $ZrB_{12}$  реализуется ян-теллеровская структурная неустойчивость борного каркаса, что приводит к модуляции ширины зоны проводимости и возникновению динамических зарядовых страйпов [1-2]. Изучение транспортных, магнитных, тепловых характеристик [1-2], а также особенностей  $\mu SR$ -спектров [3-4] в этом сверхпроводнике с электрон-фононным механизмом спаривания привело авторов [1-3] к выводам (1) о двухщелевой сверхпроводимости s-типа в грязном пределе, сопровождающейся (2) электронным фазовым расслоением наномасштаба, (3) возникновением псевдощели и (4) сильной анизотропией сверхпроводящих характеристик.

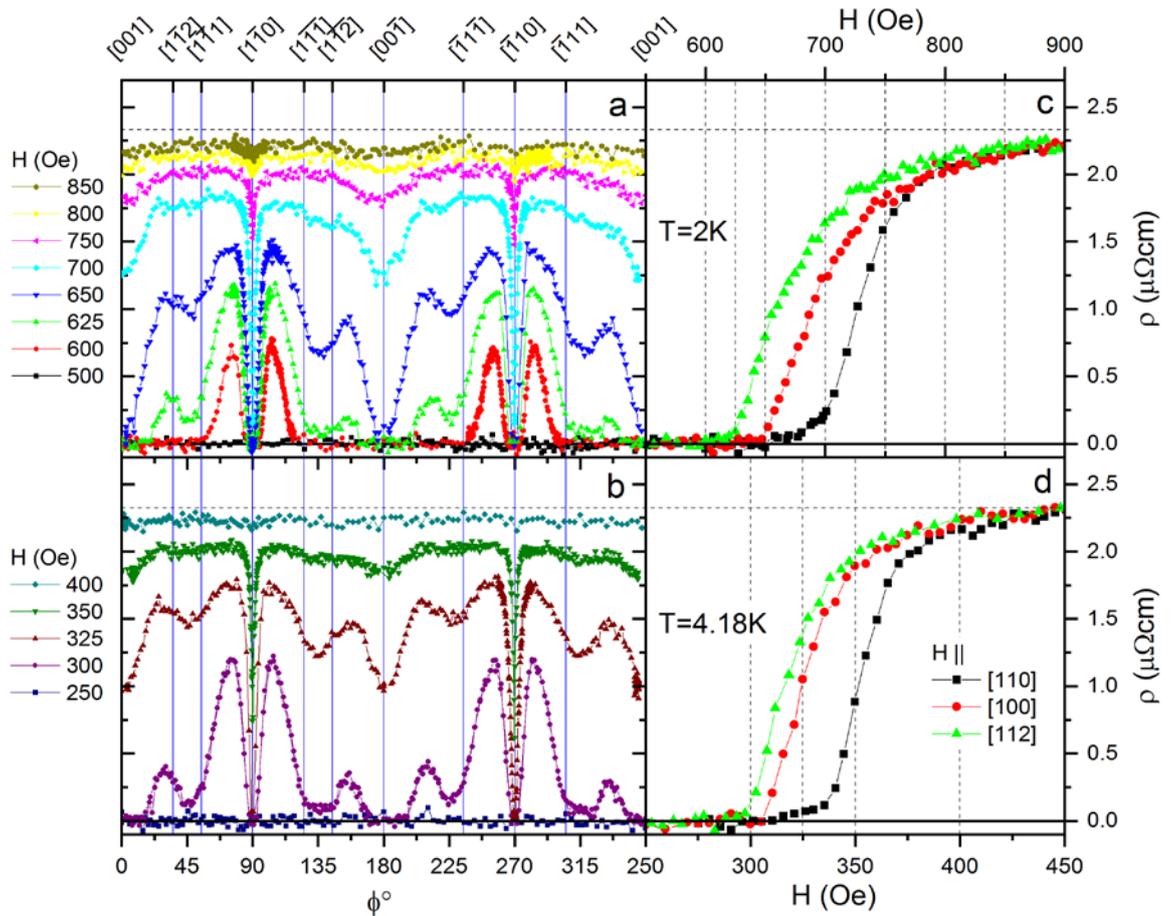


Рис.1. Угловые (панели a, b) и полевые (c, d) зависимости удельного сопротивления  $ZrV_{12}$  в окрестности сверхпроводящего перехода при температурах 2К и 4.18К. Вертикальным пунктиром на панелях (c, d) отмечены значения напряженности поля, при которых были измерены соответствующие угловые кривые (панели a, b). Горизонтальный пунктир соответствует остаточному сопротивлению  $ZrV_{12}$  перед сверхпроводящим переходом.

С целью детального изучения анизотропии сверхпроводимости в настоящей работе выполнено исследование намагниченности  $M(\varphi)$  и удельного сопротивления  $\rho(\varphi)$  в сверхпроводящей фазе  $ZrV_{12}$  при плавном изменении направления внешнего магнитного поля в широком диапазоне углов  $0-360^\circ$  в плоскостях  $H \parallel (110)$  и  $H \parallel (100)$ . Полученные результаты (см., например, рис.1) позволяют сделать выводы, что наблюдаемая анизотропия удельного сопротивления в магнитном поле вблизи перехода в нормальное состояние обусловлена как сильной анизотропией верхнего критического поля  $H_{c2}'$ , изменяющегося в диапазоне 610-1050 Э, так и поверхностной сверхпроводимостью наблюдаемой для направления  $H \parallel [110]$ . В

широком диапазоне углов в окрестности  $H//(111)$  наблюдается значительный гистерезис намагниченности  $M(\varphi)$  отвечающий сопротивлению, обусловленному движением вихрей. Полученные результаты обсуждаются в терминах анизотропной двухщелевой сверхпроводимости 1.5 рода, сосуществующей в  $ZrB_{12}$  с необычной поверхностной сверхпроводимостью.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 22-22-00243).

### Литература

1. A. Azarevich et al., Phys. Rev. B **103**, 104515, **2021**
2. N. B. Bolotina et al., Phys. Rev. B **105**, 054511, **2022**
3. F. K. K. Kirschner et al., Phys. Rev. B **98**, 094505, **2018**
4. P. K. Biswas et al., Phys. Rev. B **102**, 144523, **2020**

## ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $CaCo_{2-x}Fe_x$ ( $x=0.02-0.50$ ) МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОГРАФИИ И МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Покатилов В.С.<sup>1,3</sup>, Русаков В.С.<sup>2</sup>, Гапочка А.М.<sup>2</sup>, Сигов А.С.<sup>1</sup>,  
Боков А.В.<sup>3</sup>, Магницкая М.В.<sup>3</sup>, Цвященко А.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>МИРЭА - Российский технологический университет

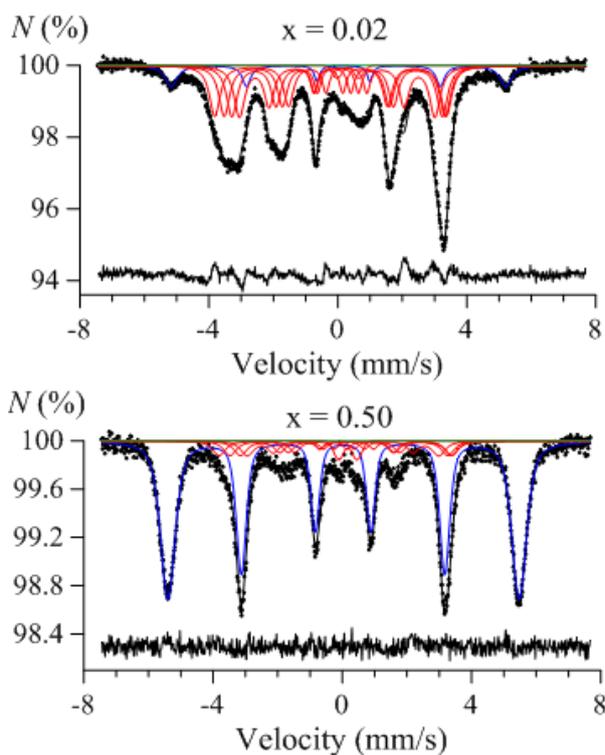
<sup>2</sup>Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

<sup>3</sup>Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

E-mail: bokov@hppi.troitsk.ru

Настоящая работа посвящена исследованию кристаллической структуры, фазового состояния, локальной атомной и магнитной структуры интерметаллической системы  $CaCo_{2-x}Fe_x$  ( $x=0.02-0.50$ ) методами рентгенографии и мёссбауэровской спектроскопии при 295 К.

Синтез образцов проводился под давлением 8 ГПа и подробно описан в [1]. Кристаллическая структура образцов системы  $CaCo_{2-x}Fe_x$  ( $x=0.02-0.50$ ) исследовалась методом порошковой рентгеновской дифрактометрии на дифрактометре MiniFlex 600 с использованием  $CuK_{\alpha}$ -излучения с длиной волны  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ . Фазовый анализ проводился с помощью программы SmartLab Studio II (Rigaku



Corporation) и базы данных PDF-2. Мёссбауэровские спектры ядер  $^{57}\text{Fe}$  снимались при температуре 295 К в геометрии поглощения на спектрометре MS1104Em (НИИ физики, г. Ростов-на-Дону). Обработка спектров осуществлялась методом модельной расшифровки с помощью программы SpectrRelax [2].

Рентгенографические исследования показали, что в системе  $\text{CaCo}_{2-x}\text{Fe}_x$  ( $x=0.02-0.50$ ) образуются две фазы: кубическая фаза Лавеса составов  $\text{CaCo}_{2-x}\text{Fe}_x$  с

пространственной группой  $O_h^7 - \text{Fd}3m$  и кубическая фаза  $\alpha\text{-Fe}$ . Параметр решетки фазы Лавеса  $a$  слегка увеличивается при росте  $x$  от  $a = 7.41 \text{ \AA}$  ( $x=0.00$  [1]), до  $7.45 \text{ \AA}$  ( $x=0.02$ ) и  $7.50 \text{ \AA}$  ( $x=0.5$ ). Параметр решетки  $\alpha\text{-Fe}$   $a = 2.845 \text{ \AA}$  не зависит от состава.

На рисунке приводятся, в качестве примера, мёссбауэровские спектры на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  в образцах с  $x=0.02$  и  $x=0.50$ . Точки – экспериментальный спектр, синяя линия, парциальный спектр для  $\alpha\text{-Fe}$  и красные линии – модельные парциальные спектры для атомов железа, замещающих атомы Co в структуре фазы Лавеса.

Обнаружено, что при росте  $x$  доля фазы Лавеса уменьшается от 88% ( $x=0.02$ ) до ~25% при ( $x=0.05$ ) и затем остается постоянной до  $x = 0.50$ .

Атомы железа в структуре расположены в кристаллографически эквивалентных позициях 16(d) – в вершинах тетраэдров (точечная симметрия  $\bar{3}m$ ) с инверсионными осями симметрии третьего порядка в направлениях  $[111]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[1\bar{1}\bar{1}]$  и  $[\bar{1}\bar{1}1]$ . Обработка экспериментальных спектров осуществлялась методом наименьших квадратов с помощью программы SpectrRelax [3] в рамках тензорного подхода к описанию анизотропии сверхтонких магнитных взаимодействий ядер  $^{57}\text{Fe}$  в соединениях  $R\text{Fe}_2$  с кубической структурой C15 [4]. В результате удалось найти оптимальные значения интересующих нас сверхтонких параметров: изомерного

сдвига  $\delta$ , константы квадрупольного взаимодействия  $e^2qQ$ , изотропного  $A_{is}$  и анизотропного  $A_{an}$  сверхтонких полей в области расположения ядра, а также азимутального  $\varphi$  и полярного  $\vartheta$  углов, задающих направление оси легкого намагничивания относительно кристаллографических осей. Для фазы Лавеса получено:  $\delta = -0.06 \pm 0.01$  мм/с;  $e^2qQ = -2,08 \pm 0.09$  мм/с;  $A_{is} = 197.2 \pm 0.8$  кЭ;  $A_{an} = 6.0 \pm 0.2$  кЭ;  $\varphi = 28^\circ \pm 2^\circ$ ;  $\vartheta = 28^\circ \pm 5^\circ$ .

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 22-22-00806).

### Литература

1. А.В. Цвященко и др. Письма в ЖЭТФ, **68**, 864, **1998**.
2. М.Е. Matsnev and V.S. Rusakov. AIP Conf. Proc., **1489**, 178, **2012**.
3. В.И. Николаев и др. Изв. АН СССР. Сер. Физ., **54**, 1681, **1990**.
4. В.С. Русаков и др. ФММ, **120**, 366, **2019**.

## ТАЙНЫ ВОДЫ И ДРУГИХ АНОМАЛЬНЫХ ЖИДКОСТЕЙ: «МЕДЛЕННЫЙ» ЗВУК, РЕЛАКСИРУЮЩИЕ СЖИМАЕМОСТЬ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ

Бражкин В.В., Данилов И.В., Циок О.Б.  
*ИФВД РАН*  
*brazhkin@hppi.troitsk.ru*

Проведен анализ причин существования «быстрого» звука на терагерцевых частотах в различных жидкостях. Показано, что величина скорости «быстрого» звука хорошо описывается обычной формулой из теории упругости:  $V_l = ((B(\omega) + 4/3G(\omega))/\rho)^{1/2}$ , где  $\rho$  – плотность жидкости, а  $B(\omega)$  и  $G(\omega)$  – модули объемного сжатия и сдвига на соответствующих частотах. В «нормальных» жидкостях превышение значения скорости «быстрого» звука над скоростью обычного звука составляет 10-20%, при этом оно почти полностью определяется вкладом модуля сдвига  $G(\omega)$  на высоких частотах и

обнуляется на линии Френкеля. В то же время в таких жидкостях (далее называемых «аномальными»), таких как вода и расплав теллура, огромное (50-120%) превышение скорости «быстрого» звука над скоростью «нормального» связано, главным образом, с сильной частотной зависимостью модуля объемного сжатия  $B(\omega)$ . Аномально низкие значения релаксирующего модуля сжатия ранее были изучены нами для многих оксидных и халькогенидных стекол в области размытых фазовых превращений под давлением. В аномальных жидкостях также происходят размытые фазовые превращения в широкой области температур и давлений, что приводит к резкому снижению модулей сжатия и скоростей звука. Таким образом, рекордно большая разница между скоростями «быстрого» и «нормального» звука в аномальных жидкостях связана не с аномально «быстрым» звуком, а с тем, что «нормальный» звук в таких жидкостях является аномально «медленным», а модули сжатия – аномально малыми. Ультразвуковые исследования аморфных льдов  $H_2O$  низкой плотности (low density amorphous - lda) и высокой плотности (high density amorphous - hda) показывают, что их модуль сжатия, действительно, в 4-5 раз превышает модуль сжатия воды. Размытые фазовые превращения в воде и расплаве теллура приводят также к аномально большим значениям теплоемкости – в 1.5-2 раза выше, чем у «нормальных» жидкостей, т.е. для аномальных жидкостей характерны не только аномальное (немонотонное) поведение физических величин, но и их аномальные абсолютные значения для большинства доступных методик измерения. Аналогичное аномальное увеличение сжимаемости и теплоемкости наблюдается, как известно, для всех флюидов в близкой окрестности критической точки жидкость-газ. На терагерцовых частотах при этом наблюдается аномально «быстрый» звук, что также связано с резким ростом величины модуля сжатия  $B(\omega)$  на высоких частотах. Вместе с тем, для аномальных жидкостей и стекол в области размытых фазовых превращений высокая сжимаемость и теплоемкость, как и большое превышение «быстрого» звука над «нормальным», не обязательно связаны с близостью критических точек и имеют место при любом сценарии размытого фазового превращения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-12-00111

# ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В МОНООКСИДЕ НИКЕЛЯ NiO

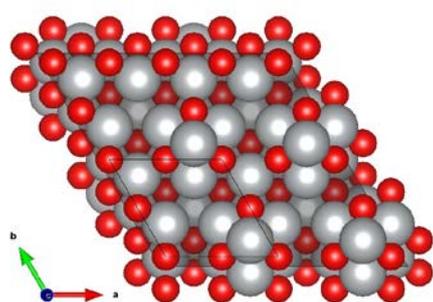
Вамбольд Н.О.<sup>1,2</sup>, Леонов И.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. первого Президента  
России Б.Н. Ельцина

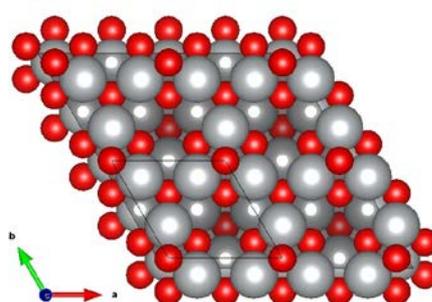
<sup>2</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева, ИФМ УрО РАН  
nikitavamb@gmail.com

Теоретические и экспериментальные исследования свойств оксидов переходных металлов и их поверхностей представляют большой фундаментальный и практический интерес [1-4]. Свойства данных систем, как правило, проявляют высокую чувствительность к малым изменениям внешних параметров, что дает широкие возможности для использования данных материалов в технологической сфере. Свойства сильно коррелированных систем с дальним магнитным порядком могут быть корректно описаны в рамках применения метода  $DFT+U$  [5], в котором учет корреляционных эффектов проводится в рамках статического приближения Хартри-Фока. В данной работе было проведено исследование взаимосвязи между электрон-электронными корреляциями и поверхностными эффектами в классическом коррелированном диэлектрике NiO. В частности, была рассчитана электронная структура, магнитные и поверхностные свойства неполярных поверхностей (001) и (110), а также полярной (111) поверхности NiO. Для полярной поверхности (111) NiO вследствие чередования положительно и отрицательно заряженных плоскостей, поверхность имеет расходящуюся электростатическую энергию [6]. Как следствие, это приводит к структурной реконструкции поверхностных слоев. В частности, в данной работе рассматривалась “octopolar” реконструкция Ni и O терминированной поверхности (111) NiO  $p(2\times 2)$  типа (см. Рис 1).  $DFT+U$  расчеты дают значительное уменьшение энергетической щели для поверхностных слоев NiO, по сравнению с объемными кристаллами, что в большей степени проявляется в случае полярной поверхности (111). Это свидетельствует о более высокой каталитической активности поверхности (111) в сравнении с (001) и (110). В дополнение в рамках  $DFT +U$  была вычислена поверхностная энергия для (001),

(110) и (111) *NiO*, а также проведен анализ зависимости поверхностной энергии с изменением эпитаксиальной деформации (сжатия/расширения решетки в плоскости роста *ab*) пленок (001), (110) и (111) *NiO*. *DFT + U* результаты для поверхностных энергий показывают, что поверхность (001) *NiO* имеет значительно меньшую энергию, чем (110) и (111) *NiO*, при этом растяжение в плоскости *ab* приводит к монотонному увеличению поверхностной энергии для (001), (110) и (111) *NiO*.



(a) Реконструкция поверхности



(b) Реконструкция поверхности, обрезанной по ионам Ni обрезанной по ионам O

Рис. 1.  $p(2 \times 2)$  “*octopolar*” реконструкции для различных поверхностей (111) *NiO*. Атомы никеля показаны серым цветом, атомы кислорода - красным. Первые два поверхностных слоя составляют 25% и 75 % от количества атомов в объемных слоях, соответственно.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-22-00926.

## Литература

1. D.U. Lee *et al.*, Nano Lett. **16**, 1794 (2016).
2. W. Zhao *et al.*, ACS Catal. **6**, 7377 (2016).
3. C.A. Ventrice *et al.*, Phys. Rev. B **49**, 5773(R) (1994).
4. I. Leonov and S. Biermann, Phys. Rev. B **103**, 165108 (2021).
5. V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, Phys. Rev. B **44**, 943 (1991).
6. P.W. Tasker, J. Phys. C: Solid State Phys. **12**, 4977 (1979).

## О ПРИЧИНАХ МЕДЛЕННОЙ РЕЛАКСАЦИИ РАСПЛАВОВ Al-Y ПОСЛЕ ПЛАВЛЕНИЯ

Васин М. Г.<sup>1</sup>, Шкляев К. Я.<sup>2,3</sup>, Лебедев В. Г.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики высоких давлений им.Верещагина Л.Ф. РАН

<sup>2</sup>Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО. РАН

<sup>3</sup>Удмуртский государственный университет

dr\_vasin@mail.ru

Целью работы является теоретическое объяснение природы медленных,  $\sim 10^4$  с, релаксационных процессов, наблюдаемых после плавления в некоторых стеклообразующих эвтектических расплавах [1–3]. Мы утверждаем, что вероятной причиной медленной релаксации является нелинейность диффузионных процессов в гетерогенном расплаве с включениями тугоплавкой стехиометрии. Причиной нелинейности является термодинамическая неустойчивость, подобная той, которая имеет место при спинодальном распаде, а необходимым условием – неоднородность исходного расплава. Для подтверждения наших предположений рассмотрена модель жидкого раствора бинарной системы, эволюция

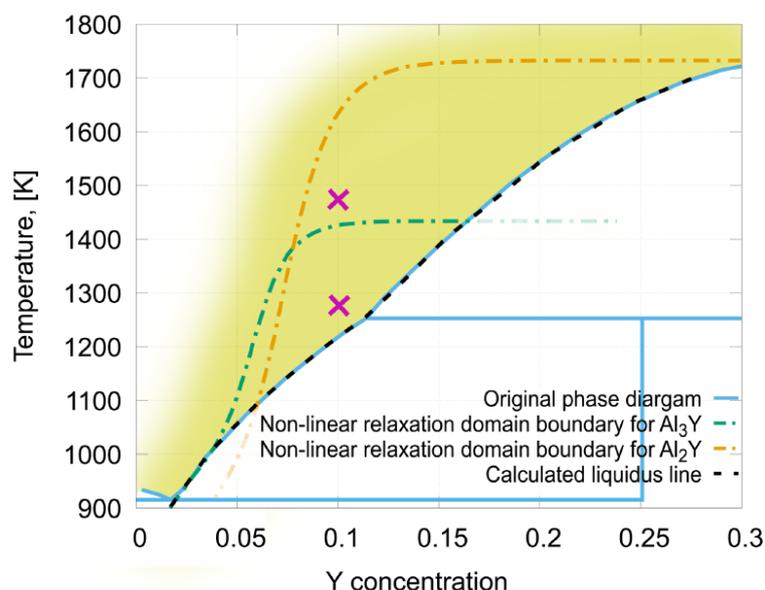


Рис.1. Фазовая диаграмма Al-Y с выделенной областью нелинейной медленной релаксации в жидкой фазе. Крестиками обозначены параметры расплавов, в которых наблюдалась медленная релаксация.

которой описывается уравнением Кана-Хиллиарда с комбинированным потенциалом Гиббса в предположении наличия остатков после плавления стехиометрической фазы. На примере сплавов Al-Y и Al-Yb, используя потенциалы Гиббса из стандартной базы данных [4], мы показываем, что при наличии начальной неоднородности в этих системах может развиваться неустойчивость, приводящая к медленным релаксационным процессам, и определяем области этой неустойчивости на фазовых диаграммах (см. рис.1). Оценка пространственного масштаба исходных концентрационных неоднородностей, необходимых для проявления нелинейной диффузии, хорошо согласуется с наблюдаемыми размерами интерметаллических включений в исходных образцах перед их плавлением,  $\sim 10^{-5}-10^{-6}$  м.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ (№ 21-13-00202).

#### Литература

1. L. Son, M. Vasin, V. Sidorov, G. Rusakov, Journal of Alloys and Compounds, **785**, 1279, **2019**
2. V.M. Zamiatin, B.A. Baum, A.A. Mezenina, et al., Rasplavi (in Russ.) **5**, 19, **2010**
3. V.I. Lad'yanov , A.L. Bel'tyukov , S.G. Menshikova, et al., Physics and Chemistry of Liquids, **46**, 71, **2008**
4. URL: <http://cpddb.nims.go.jp/cpddb/periodic.htm> 25.09.2018.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ И СТРУКТУРЫ ГИДРАТА МЕТАНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Власов Р. В., Мокшин А. В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия  
roman.vlasoff@outlook.com*

Газовые гидраты – кристаллические соединения стабильные при низкой температуре и высоком давлении. Эти соединения состоят из клеток (хозяин), образованных молекулами воды, и вложенных в них молекул газа (гость) [1]. Интенсивное изучение газовых гидратов связано с их потенциалом в энергетической сфере, возможностями

опреснения воды, газоразделения и транспортировка газов, а также из-за проблем гидратообразования в стволах скважин. На данный момент термодинамические свойства газовых гидратов достаточно изучены и хорошо установлены [2], однако остается много открытых вопросов, связанных с процессом их зарождения и формирования [3].

В рамках моделирования молекулярной динамики исследуется процесс нуклеации и формирования гидрата метана при  $T = 250$  К и  $p = 50$  МПа. Установлено, что рост гидрата происходит через аморфную фазу с последующей кристаллизацией, что фиксируется по параметрам порядка  $F_3$  и  $F_4$ . В рамках кластерного анализа определены гидратные клетки в системе и их количество. Обнаружено, что происходит трансформация клеток по мере роста новой фазы. Время зарождения новой гидратной фазы  $T_n \approx 10$  ps определено с помощью метода MFPT.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 19-12-00022).

#### Литература

1. E. D. Sloan, Nature, **426**, 353, **2003**
2. K. C. Hester, P. G. Brewer, Science, **1**, 303, **2009**
3. G. J. Guo, Z. C. Zhang, Commun. Chem., **4**, 102, **2021**

### **<sup>11</sup>В ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ БОРИРОВАННЫХ АЛМАЗОВ**

Волкова З. Н.<sup>1</sup>, Филоненко В. П.<sup>2</sup>, Баграмов Р. Х.<sup>2</sup>, Краснорусский В. Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия*

<sup>2</sup>*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина,  
Троицк, Москва, Россия*

*E-mail: volkovazn@imp.uran.ru*

Открытие сверхпроводимости в сильно легированных бором алмазах вызвало большой всплеск интереса. Однако, несмотря на большое количество исследований, взаимосвязь между структурой и физическими свойствами борированных алмазов до конца не

установлена. В данном контексте метод ЯМР  $^{11}\text{B}$  высокого разрешения (с вращением под магическим углом) имеет особое значение, поскольку позволяет выявить локальные особенности расположения атомов бора в кристаллической структуре и их влияние на свойства алмазов.

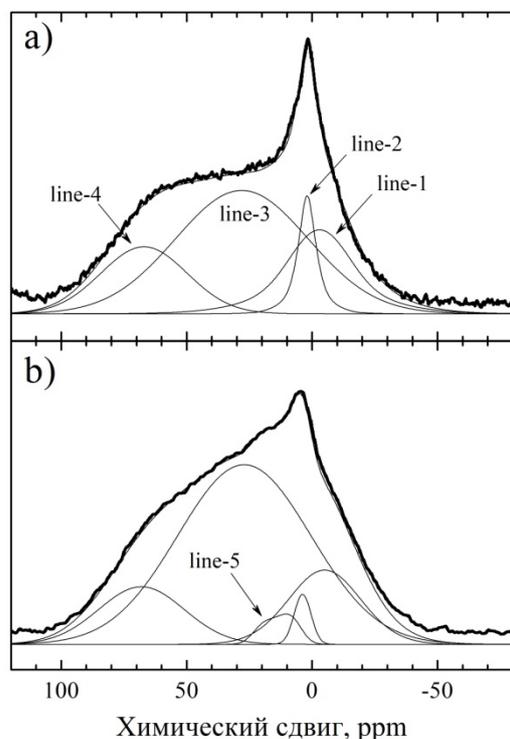


Рис. 1. Спектры ЯМР  $^{11}\text{B}$ , записанные в магнитном поле 11.74 Т с частотой вращения 20 кГц: а) S1, б) S2.

В данной работе для алмазов S1 и S2 импульсным методом были записаны спектры ЯМР  $^{11}\text{B}$  высокого разрешения в магнитном поле 11.74 Т с частотой вращения 20 кГц при варьировании параметра D1 (времени повторения циклов импульсных последовательностей) от 50 ms до 60 s. На рис. 1 приведены примеры спектров, записанные с D1 = 10 s. Установлено, что спектры представляют собой суперпозицию линий, соответствующих различным окружениям бора с различными временами спин-решеточной релаксации  $T_1$ . На рис. 1 показано разложение спектров S1 и S2 на компоненты, имеющие химические сдвиги: -4 ppm, 2 ppm, 28 ppm, 64 ppm и 14 ppm (line-1, line-2, line-3, line-4 и line-5 соответственно).

Line-1 и line-2 представляют собой вклады в сигнал от примесных фаз, соответствующих карбиду бора  $\text{B}_4\text{C}$  и кубическому

Ранее в [1] методом ЯМР было показано, что сверхпроводимость борированных алмазов связана с общим содержанием бора в решетке и наблюдается в образцах с легированием более 2%. В настоящей работе исследовались микропорошки алмазов S1 и S2, синтезированные в условиях высоких давлений и температур из различных прекурсоров [2]. Содержание бора в S1 и S2 составляло ~1% и ~1.2% соответственно. Причем диамагнитный вклад в восприимчивость, свидетельствующий о наличии сверхпроводящей фазы, обнаружен только в образце S2 при  $T < 3.2$  К.

нитриду бора cBN. Основной вклад в спектры (line-3) соответствует бору, замещающему атом углерода в алмазной решетке. Он имеет тетрагональное окружение  $BC_4$  и, согласно [1], отвечает за проводимость (сверхпроводимость), что подтверждается самым коротким временем спин-решеточной релаксации ( $T_1 \approx 0.9$  s). Вклад line-4 дает бор в тригональном графитоподобном окружении  $BC_3$ , предположительно находящийся рядом с вакансией. Линию с химическим сдвигом 14 ppm (line-5) в S2 можно отнести к окружению бора с атомами кислорода [3].

Сравнение интегральной интенсивности компонент спектров исследуемых образцов позволило установить, что в алмазном порошке S2 концентрация бора в основной  $BC_4$  позиции на ~30% больше, чем в S1 при близкой общей концентрации бора в решетке алмаза. Этот факт, скорее всего, и обуславливает появление сверхпроводимости в S2 при низких температурах.

Таким образом, метод ЯМР показал свою эффективность в определении фазового состава исследуемых образцов, позволил установить, что наряду с основным тетрагональным окружением бора  $BC_4$  в алмазах присутствует достаточно большое количество тригонального  $BC_3$  бора, связанного с вакансиями, а также выявить взаимосвязь между количеством бора в основной позиции и сверхпроводящими свойствами борированных алмазов.

## Литература

1. M. Murakami et al., *Diamond & Related Materials* **17**, 1835, 2008
2. I.P. Zibrov, V.P. Filonenko, *Crystals* **8**, 297, 2018
3. F. Angeli et al., *Physical Review B* **85**, 054110, 2012

## ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СКРУЧЕННЫХ МЕТАПОВЕРХНОСТЕЙ

Вяткин Е. С., Пошакинский А. В., Тарасенко С. А.  
*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*  
*egor.vyatkin@bk.ru*

В области нанофотоники, исследующей управление светом на наномасштабах, в последние годы наблюдается значительный прогресс. Особенный интерес представляют искусственные

киральные наноструктуры, которые могут быть использованы, например, для реализации источников циркулярно поляризованного света [1]. Одним из популярных типов киральных фотонных структур являются скрученные стеки двумерных материалов, свойствами которых можно управлять, варьируя угол скручивания [2,3].

В данной работе теоретически исследуются оптические свойства системы, состоящей из двух идентичных диэлектрических слоев, расположенных на расстоянии  $d$  и повернутых друг относительно друга на угол  $\varphi$ , см. рис. 1 (а). Диэлектрическая проницаемость каждого слоя в данной модели полагается периодически модулированной в форме квадратной решетки с периодом меньше длины волны света. При прохождении плоской волны через изолированный слой ее поляризация не меняется, однако при сближении пары слоев они начинают взаимодействовать через свои ближние поля, представляющие собой дифрагированные эванесцентные волны. Это приводит к проявлению эффектов оптической анизотропии – линейно поляризованный опорный пучок при прохождении через систему, вращает плоскость поляризации (оптическая активность) и приобретает эллиптичность (циркулярный дихроизм). Данные эффекты наиболее сильно проявляются на частотах собственных волноводных мод системы и дополнительно усиливаются при углах скручивания близких к 30 и 60 градусам (рис. 1 (b) и (c)).

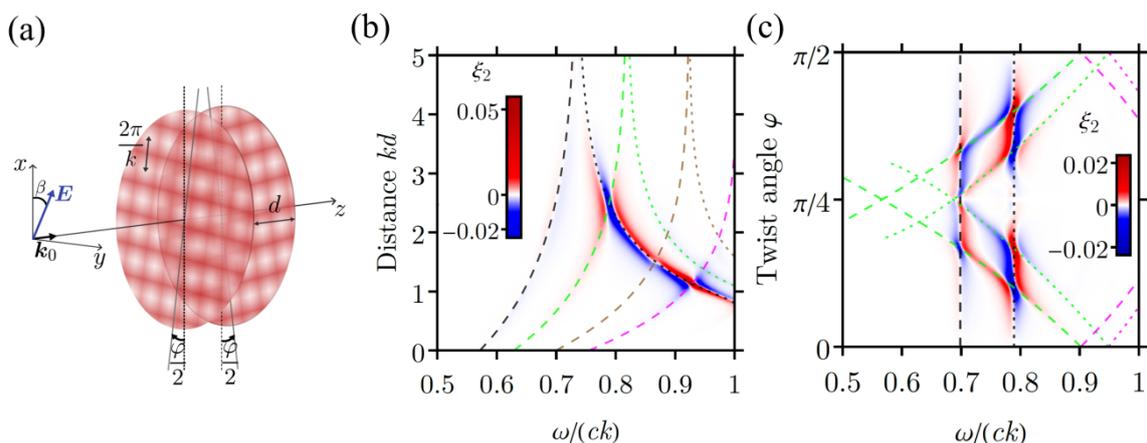


Рис. 1. (а) Схематическое изображение рассматриваемой системы. Степень циркулярной поляризации прошедшего света в зависимости (b) от частоты падающего света и расстояния между слоями и (c) от частоты и угла скручивания. Линиями показаны частоты собственных волноводных мод системы.

Наложение пространственной модуляции диэлектрической проницаемости двух слоев приводит к появлению муара. При достаточно малом угле скручивания рассеяние на муаре приводит к возникновению дифрагированных на малый угол лучей, обладающих частичной циркулярной поляризацией. Интерференция опорного и дифрагированных лучей становится причиной осцилляций степени циркулярной поляризации света в плоскости слоев.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 21-72-10035.

#### Литература

1. S.V. Lobanov, S.G. Tikhodeev, N.A. Gippius *et al.*, Phys. Rev. B **92**, 205309, **2015**.
2. A.V. Poshakinskiy, D.R. Kazanov, T.V. Shubina, S.A. Tarasenko, Nanophotonics **7**, 753, **2018**.
3. B. Lou, N. Zhao, M. Minkov *et al*, Phys. Rev. Lett. **126**, 136101, **2021**.

## РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ФЕРРИТОВ $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_{3-\delta}$

Гавриличева К. А., Баркалов О. И.

*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН,*

*Черноголовка, Россия*

*xenia.gavrilicheva@issp.ac.ru*

Ферриты перовскитоподобного типа ( $\text{ABO}_Y$ ), где **A** – щелочной (щелочноземельный) катион, **B** – 3d, 4d, 5d катион металла, **O** – анион кислорода, всё чаще стали применять в качестве катодных материалов топливных элементов, в спинтронике, микроэлектронике. Они являются катализаторами и могут быть использованы при утилизации органических отходов и разложении углеводородов.

Замещение в структуре феррита  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_{3-\delta}$  ионов  $\text{La}^{3+}$  на  $\text{Sr}^{2+}$  позволяет увеличивать количество вакансий кислорода при вакуумном отжиге. С ростом температуры вакуумного отжига происходит переход всех ионов железа от  $\text{Fe}^{4+}$  к  $\text{Fe}^{3+}$  [1].

Смешанные ферриты  $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{FeO}_{3-\delta}$  были синтезированы золь-гель методом, их КРС спектры после вакуумного отжига представлены на рис. 1.

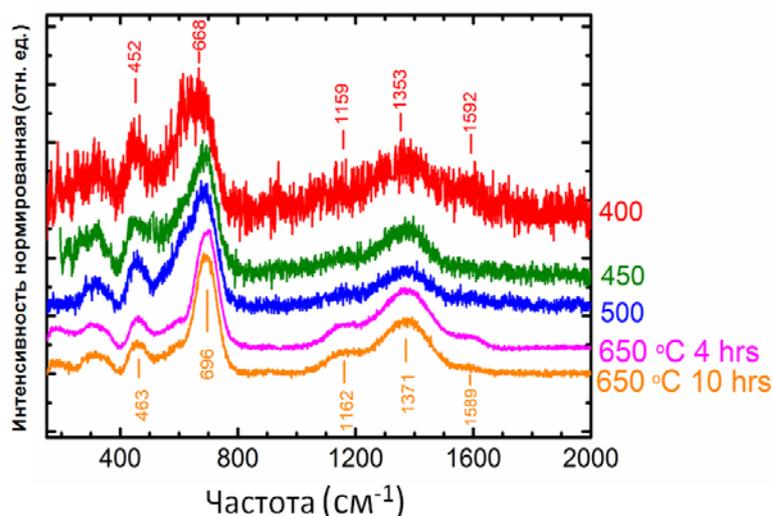


Рис. 1. КРС спектры ферритов  $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{FeO}_{3-\delta}$  [1]. Образцы отжигали в вакууме ( $10^{-3}$  мм рт. ст., 4 часа) при 400 - 650°C. Интенсивности спектров нормированы на амплитуду пика при  $\sim 670$   $\text{cm}^{-1}$

В работе [2] методом КРС спектроскопии были изучены ферриты редкоземельных элементов и проведены расчеты для  $\text{LaFeO}_3$ , которые позволили отнести наблюдаемые в настоящей работе пики, при частотах ниже  $1000$   $\text{cm}^{-1}$ , к различным модам колебаний Fe-O (Рис. 2).

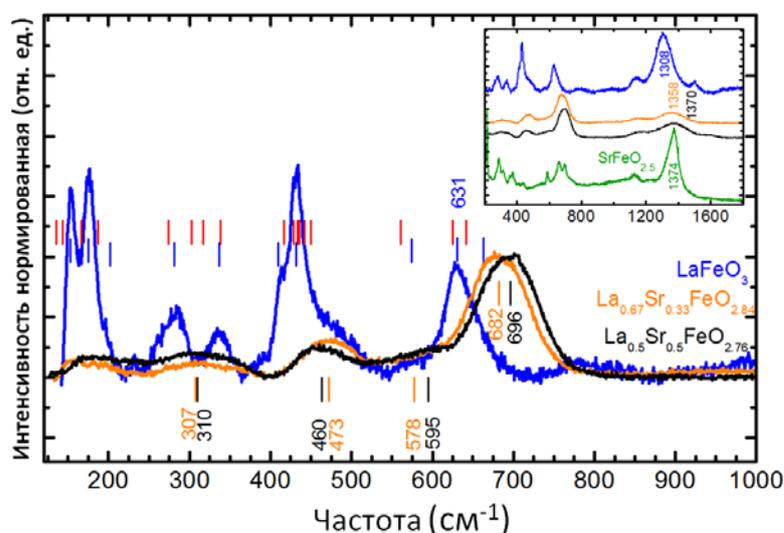


Рис. 2. КРС спектры смешанных ферритов  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_{3-\delta}$  с ионами железа  $\text{Fe}^{3+}$ . Красные вертикальные штрихи обозначают экспериментальные результаты для  $\text{LaFeO}_3$ , представленные в [2]; оранжевая кривая – из [3]. На вставке - спектры в широком диапазоне частот

Высокочастотные пики ( $>1000 \text{ см}^{-1}$ ) были отнесены к двухмагنونному рассеянию по аналогии с антиферромагнетиком  $\text{LaFeO}_3$ .

С ростом температуры вакуумного отжига уменьшается ширина и растет амплитуда пиков КРС спектров, что говорит о понижении степени дефектности кристаллической структуры  $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{FeO}_{3-\delta}$ .

Появление кислородных вакансий в смешанных ферритах приводит к заметному повышению частоты пика двухмагنونного рассеяния (вставка, Рисунок 2).

#### Литература

1. V. Sedykh, V. Rusakov, O. Rybchenko, A. Gapochka, K. Gavrilicheva, O. Barkalov, S. Zaitsev, V. Kulakov, Fe ion valence states and oxygen vacancies in the  $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{FeO}_{3-\gamma}$  ferrite under vacuum annealing, *Ceramics International*. (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.05.105>.
2. M.C. Weber et al., Raman spectroscopy of rare-earth orthoferrites  $\text{RFeO}_3$  ( $\text{R} = \text{La, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy}$ ), *Phys. Rev. B*. 94 (2016) 214103. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.214103>.
3. V. Sedykh et al., Role of Fe atom valence states and oxygen vacancies in substituted lanthanum ferrite  $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{FeO}_{3-\gamma}$ , *J. Phys. Chem. Solids*. 171 (2022) 111001. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2022.111001>.

## ЭФФЕКТ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ И ДАЛЬНИЙ МАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В NiO ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Гайфутдинов Г.М.<sup>1,2</sup>, Леонов И.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева, ИФМ УрО РАН*

<sup>2</sup>*Физико-технологический институт, УрФУ*  
*georgy.gaifutdinov@gmail.com*

В последние несколько десятилетий большое внимание было уделено проблеме микроскопического объяснения физических свойств и явлений, наблюдаемых в материалах с сильно коррелированными электронами. В данных системах реализуется сложная взаимосвязь между эффектом межэлектронного взаимодействия и спиновыми, орбитальными и решеточными степенями свободы, что приводит к обширному многообразию из структурных фаз и эффектов спинового, орбитального и/или зарядового упорядочений [1,2,3]. Как результат, свойства данных материалов проявляют большую чувствительность к малым

изменениям внешних параметров, а сами материалы обладают сложным строением фазовой диаграммы. Все это делает исследования свойств сильно коррелированных соединений крайне востребованным как в плане фундаментальных исследований, так и в рамках разработки новых функциональных материалов с заданными свойствами для возможных технологических применений в современной микро-, опто- и нано-электронике. Было показано, что использование современного подхода DFT+теория динамического среднего поля (DFT+DMFT) позволяет вычислить многие свойства сильно коррелированных материалов в согласии с экспериментальными данными – определить особенности их электронного строения, параметров магнитного упорядочения при конечных температурах, а также описать локализацию  $d$ - (или  $f$ -) состояний переходного металла вблизи перехода Мотта диэлектрик-металл [3-6]. В данной работе в рамках применения метода DFT+DMFT была исследована фазовая диаграмма давление-температура сильно коррелированного диэлектрика с переносом заряда, оксида NiO [2]. В частности, в рамках DFT+DMFT было проведено моделирование взаимовлияния эффекта электронных корреляций и дальнего магнитного порядка (AFM) в NiO в области высоких давлений и температур. Был произведен самосогласованный DFT+DMFT расчет электронной структуры, магнитного состояния, величины обменных взаимодействий и параметров уравнения состояния. В рамках DFT+DMFT был проведен подробный анализ поведения магнитной восприимчивости и спинового состояния ионов Ni с изменением давления и температуры. Интересно, что вплоть до сверхвысоких давлений  $\sim 0.4 V_0$  NiO (с кубической кристаллической решеткой) остается в диэлектрическом состоянии с дальним AFM порядком, в согласии с данными комбинированной рентгеновской дифракции и эмиссионной спектроскопии (XRD и XES) [7]. В то же время, для NiO в парамагнитном состоянии DFT+DMFT расчеты предсказывают наличие перехода Мотта диэлектрик-металл при сжатии свыше  $\sim 0.54 V_0$ . DFT+DMFT результаты свидетельствуют о немонотонном поведении температуры Нееля ( $T_N$ ) под давлением, с максимумом  $T_N \sim 4 T_N (P=0 \text{ ГПа})$  для  $V \sim 0.5 V_0$ , что объясняется кроссовером между локализованным состоянием Мотта для ( $P=0 \text{ ГПа}$ ) и слабо коррелированным диэлектрическим состоянием слэтеровского (зонного) типа (для сжатия свыше  $\sim 0.5 V_0$ ).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-22-00926.

## Литература

1. Kohn W, Rev. Mod. Phys., **71**, 5, 1253, **1999**
2. Zaanen J., Sawatzky G. A., Allen J. W., PRL, **55**, 4, 418, **1985**
3. Georges A. et al, Rev. Mod. Phys., **68**, 1, 13, **1996**
4. Kotliar G. et al., Rev. Mod. Phys., **78**, 3, 865, **2006**
5. Leonov I. et al., Phys. Rev. B., **101**, 245144, **2020**
6. Leonov I. et al, Phys. Rev. B., **94**, 155135, **2016**
7. Potapkin V. et al, Phys. Rev. B., **93**, 201110(R), **2016**

## **ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АМОРФООБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

Галимзянов Б. Н., Доронина М. А., Мокшин А. В.  
*Казанский (Приволжский) федеральный университет*  
*bulatgnmail@gmail.com*

Синтез аморфного металлического сплава с заданными механическими свойствами может потребовать перебора различных комбинаций составов с последующим механическим испытанием. Это делает процесс синтеза новых сплавов чрезвычайно сложным и значительно увеличивает затраты. В то же время бурное развитие информационных технологий и автоматизация процессов сбора и хранения данных способствовали накоплению и систематизации информации о физико-механических свойствах аморфных металлических сплавов [1]. Поэтому разработка методов конструирования аморфных металлических сплавов с заданными механическими свойствами, основанных на обработке больших данных моделями машинного обучения, является одним из наиболее перспективных направлений современного материаловедения [2-3].

В настоящей работе предложен метод определения аморфных металлических сплавов с требуемыми механическими свойствами [4]. Схема реализации этого метода представлена на рисунке 1. С помощью искусственных нейронных сетей, обученных на фундаментальных физических свойствах химических элементов, было рассмотрено более 50 000 аморфных сплавов различного состава. Для них были оценены модуль Юнга и предел текучести. Статистическая обработка полученных результатов показывает, что

наиболее значимыми факторами являются фундаментальные физические свойства химического элемента с наибольшей массовой долей, входящей в состав сплава. Показано, что значения модуля Юнга и предела текучести аморфных сплавов на основе Cr, Fe, Co, Ni, Nb, Mo и W, полученных добавками полуметаллов (например, Be, V, Al, Sn), неметаллов (например, Si и P) и лантаноидов (например, La и Gd) выше, чем для сплавов других составов. Увеличение количества компонентов в сплаве с 2 до 7 и изменение массовой доли химических элементов не оказывает существенного влияния на прочностные характеристики.

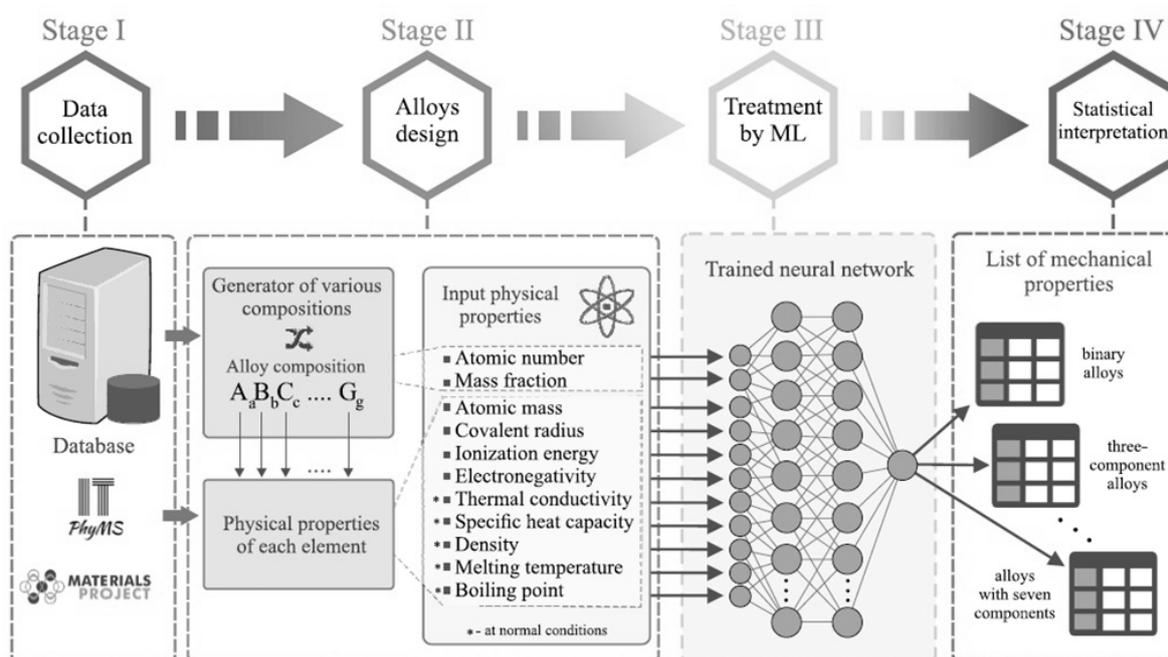


Рис. 1. Схема реализации метода определения аморфных металлических сплавов и расчета их механических свойств.

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

### Литература

1. J. F. Jr. Rodrigues, L. Florea, M. C. F. de Oliveira, D. Diamond, O. N. Jr. Oliveira, *Discov. Mater.*, **1**, 12, **2021**
2. J. Xiong, T. Y. Zhang, S. Q. Shi, *MRS Commun.*, **9**, 576, **2019**.
3. M. K. Tripathi, R. Kumar, R. Tripathi, *Mater. Today Proc.*, **26**, 1245, **2020**
4. B. N. Galimzyanov, M. A. Doronina, A. V. Mokshin, *Metals*, **13**, 812, **2023**

# ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ: ОТ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ К НИЗКОРАЗМЕРНЫМ МАГНЕТИКАМ

Гиппиус А. А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>ФИАН им. П.Н. Лебедева

e-mail: gippius@mail.ru

Данный обзорный доклад состоит из трех частей. В первой, вводной, части будут рассмотрены основные теоретические принципы и экспериментальные методы современной спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) применительно к физике конденсированного состояния, а также основные идеи и методы, лежащие в основе создания и эксплуатации современного спектрометра ЯМР, предназначенного для проведения научных исследований в области физики конденсированного состояния. Поскольку спектры ЯМР твердых тел, как правило, представляют собой широкие (от сотен кГц до десятков МГц) линии, часто со сложной структурой, обусловленной магнитными и(или) квадрупольными взаимодействиями, то амплитуда сигнала ЯМР, которую необходимо зарегистрировать в эксперименте, весьма мала (от сотен нВ до десятков мкВ). В связи с этим важнейшее значение приобретает проблема чувствительности спектрометра. Помимо аппаратных методов (использование малошумящих предусилителей, повышения разрядности АЦП и т.п.) важнейшим фактором повышения чувствительности является понижение температуры образца до гелиевых температур.

Во второй части доклада будут рассмотрены конкретные примеры использования спектроскопии ЯМР в исследовании различных классов сверхпроводников. Основное внимание будет уделено возможностям метода ЯМР для определения механизма спаривания и характеристик сверхпроводящей щели, как в классических сверхпроводниках БКШ, так и в необычных: купратных ВТСП, тяжелофермионных и железосодержащих сверхпроводниках. Более подробно будут рассмотрены результаты недавних экспериментальных исследований нового семейства интерметаллических сверхпроводников на основе галлия:  $\text{Mo}_4\text{Ga}_{20}\text{Sb}$  и  $\text{Mo}_8\text{Ga}_{41}\text{Sb}$ .

В третьей, заключительной, части доклада будут приведены примеры использования ЯМР спектроскопии в исследовании основного состояния различных низкоразмерных спиновых систем. Будет рассмотрена уникальная система тримеров меди в соединении  $\text{Ba}_3\text{Cu}_3\text{In}_4\text{O}_{12}$  с 3-мерной решеткой Шастри-Сазерленда (Shastry – Sutherland). Кроме того, будет продемонстрирована возможность экспериментального обнаружения с помощью ЯМР геликоидальной магнитной структуры в соединении  $\text{LiCu}_2(\text{VO}_4)(\text{OH})_2$ .

В докладе использованы экспериментальные результаты, полученные в Лаборатории ЯМР конденсированного состояния кафедры физики низких температур и сверхпроводимости Физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова и Лаборатории ЯМР твердого тела ФИАН им. П.Н. Лебедева.

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-15-2021-1353.

## **ИЗУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕОДНОРОДНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ С ПОМОЩЬЮ ТРАНСПОРТНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ**

Григорьев П. Д.<sup>1,2</sup>, Кочев В. Д.<sup>2</sup>, Сеидов С. С.<sup>2</sup>, А.В. Фролов<sup>3</sup>,  
Орлов. А.П.<sup>3</sup> и Синченко А.А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН  
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский технологический  
университет «МИСИС», 119049, Москва, Россия*

<sup>3</sup> *Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова  
РАН, Москва, Россия  
grigorev@itp.ac.ru*

Наблюдаемое часто анизотропное падение сопротивления выше  $T_c$ , с максимальным эффектом вдоль оси наименьшей проводимости, не описываемое стандартной теорией флуктуаций [1], мы объясняем неоднородным сверхпроводящим состоянием и описываем в приближении эффективной среды [2], обобщенном нами на анизотропные проводники [3-6]. Это позволяет определять на основе данных о температурной зависимости анизотропии сопротивления объемную долю сверхпроводящей фазы и усредненное отношение

размеров сверхпроводящих островков вдоль главных осей кристалла. Данные о диамагнитном отклике вместе с транспортными измерениями позволяют оценить размер сверхпроводящих островков.

Еще больше информации о неоднородном сверхпроводящем состоянии дает анизотропия температуры  $T_c$  перехода в нулевое сопротивление, наблюдаемая нами в FeSe [7,8], а также во многих органических сверхпроводниках [9-11]. Мы наблюдаем [7,8] и объясняем [8], что  $T_c$  измеренная по сопротивлению вдоль оси  $z$  в тонких образцах FeSe повышается при уменьшении их толщины с 300 до 50 нм с 8 до 11К. Сравнение наших численных расчетов [8,12] порога перколяции в образцах конечных размеров в FeSe [8] и в органических металлах [12,13], позволяет не только объяснить экспериментальные данные по анизотропии и росту  $T_c$ , но и дает информацию о характерных размерах и форме сверхпроводящих островков вдали от поверхности образца, не доступную другими экспериментальными методами. Наши модель и расчеты применимы ко многим неоднородным сверхпроводникам, включая ВТСП.

Для FeSe мы получаем [8] размер  $d_x \sim 100$  нм сверхпроводящих островков в плоскости  $x$ - $y$ , а их соотношение сторон  $d_z/d_x \sim 0.15$ . Это сравнимо с шириной нематических доменов и указывает на возможную природу появления сверхпроводящих доменов такого большого размера в FeSe. В органических металлах мы получили размер сверхпроводящих доменов больше 2 мкм [13], что согласуется с данными об угловой зависимости магнитосопротивления [10]. Мы предлагаем [14], что причина появления таких доменов в органических сверхпроводниках – фазовый переход первого рода между волной спиновой плотности и металлическим состояниями.

Исследование выполнено при поддержке гранта К2-2022-025 в рамках федеральной программы Приоритет-2030 НИТУ «МИСиС», РФФИ № 21-52-12027, и гранта № 22-1-1-24-1 фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

#### Литература

1. А.А. Варламов и А.И. Ларкин, Теория флуктуаций в сверхпроводниках, Москва, "Добросвет", 2007
2. S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials*, Springer New York, 2002.
3. А.А. Sinchenko, P.D. Grigoriev, A. P. Orlov et al., Phys. Rev. B **95**, 165120 (2017).
4. P.D. Grigoriev, A.A. Sinchenko, K.K. Kesharpu et al., JETP Lett. **105**, 786

- (2017).
5. S.S. Seidov, K.K. Kesharpu, P.I. Karpov, P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B **98**, 014515 (2018).
  6. K.K. Kesharpu, V.D. Kochev, P.D. Grigoriev, Crystals, **11**, 72 (2021).
  7. T.I. Mogilyuk, P.D. Grigoriev, K.K. Kesharpu, I.A. Kolesnikov, A.A. Sinchenko, A.V. Frolov, A.P. Orlov, Phys. Solid State **61**, 1549 (2019).
  8. P.D. Grigoriev, V.D. Kochev, A.P. Orlov, A.V. Frolov, A.A. Sinchenko, Materials, **16**(5), 1840 (2023).
  9. N. Kang, B. Salameh et al., Phys. Rev. B **81**, 100509(R) (2010).
  10. A. Narayanan et al., Phys. Rev. Lett. **112**, 146402 (2014).
  11. Y.A. Gerasimenko et al., Phys. Rev. B **89**, 054518 (2014).
  12. V.D. Kochev, K.K. Kesharpu, P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B **103**, 014519 (2021).
  13. V.D. Kochev, S.S. Seidov, P.D. Grigoriev, arXiv:2305.14510.
  14. S.S. Seidov, V.D. Kochev, P.D. Grigoriev, arXiv:2305.06957.

## **РАСЧЕТ ПРОВОДИМОСТИ ДОПИРОВАННЫХ МАНГАНИТОВ ОБЛАДАЮЩИХ ЭФФЕКТОМ КОЛОССАЛЬНОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ**

Гудин С.А.

<sup>1</sup> *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия  
e-mail: gudin@imp.uran.ru*

Открытие в манганитах эффекта колоссального магнитосопротивления (КМС) стало вызовом для существующей электронной теории вещества. Хотя за прошедшие 25 лет написаны тысячи статей, посвященных этой проблеме, так и не получено теоретическое описание температурной зависимости КМС, адекватно описывающее экспериментально наблюдаемое поведение на широком температурном интервале. Поэтому, остается актуальной задача теоретического анализа и описания экспериментальных данных по температурному поведению сопротивления в магнитных полях в допированных манганитах, где величина КМС близка к рекордной.

В цикле работ [1] – [9] проведены теоретические исследования свойств допированных манганитов, обладающих эффектом КМС, в магнитных полях от 0 до 90 кОе и в диапазоне температур от 4 до 400 К. Разработан метод разделения вкладов в магнитосопротивление от нескольких механизмов проводимости, описано наблюдаемое

магнитосопротивление (с величиной превышающей 1000) манганита  $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$  в диапазоне температур 4-300 К, получено отличное согласие расчетных и экспериментальных данных. Показано, что магнитосопротивление определяется «спин-поляронным» и «ориентационным» механизмами проводимости, т.е. МС определяется изменением размеров и направлений магнитных моментов магнитных неоднородностей (спиновых поляронов). Вычислены температурные зависимости размера спинового полярона (в относительных единицах). Показано, что величина колоссального магнитосопротивления обеспечивается за счет увеличения (вдоль магнитного поля) линейного размера спинового полярона, т.е. основную роль в величину колоссального магнитосопротивления вносит изменение размеров магнитных неоднородностей кристалла.

В гранулированном керамическом манганите  $\text{La}_{0.8}\text{Ag}_{0.1}\text{MnO}_3$  при исследовании влияния высокого гидростатического давления до 8.5 ГПа на транспортные свойства была обнаружена и объяснена аномалия в виде излома линейного хода барической зависимости сопротивления при  $P_C=3.85$  ГПа [9]. Показано, что обнаруженный переход в точке  $P_C$  из одного линейного изменения барического хода удельного сопротивления в другое (построенный в логарифмическом масштабе) однозначно связан с существованием в керамическом образце двух процессов рассеяния, — внутризернового и приграничного. Вблизи  $P_C$  оба процесса рассеяния вносят сравнимые по величине вклады в удельное сопротивление. Для давлений меньше 3.85 ГПа преобладает вклад в сопротивление от механизмов рассеяния в приграничных слоях зерен, а для высоких давлений преобладает вклад от области однородного зерна.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ «Квант» No 122021000038-7.

### Литература

1. М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев, С.А. Гудин, и др. ЖЭТФ **143**, 948, **2013**.
2. М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев, С.А. Гудин, и др. ФТТ **53**, 896, **2013**.
3. С.А. Гудин, Н.Н. Гапонцева, Э.А. Нейфельд и др. Изв. РАН. Сер. физ. **78**, 1142, **2014**
4. С.А.Гудин, М.И.Куркин, и др. ЖЭТФ, **148** (5), 1005, **2015**.
5. С.А.Гудин, Н.И.Солин, и др., ФТТ, **60** (6), 1067, **2018**.
6. С.А.Гудин, Н.И.Солин ЖЭТФ, **157** (4), 648, **2020**.

7. С.А.Гудин, Н.И.Солин ФТТ, **62** (5), 669, **2020**.
8. С.А.Гудин ФТТ, **63**, 12, 1978, **2021**
9. А.Г.Гамзатов, С.А. Гудин, Т.Р.Арсланов, и др. Письма в ЖЭТФ **115**, 4, 218, **2022**

## **ПОЛИДИСПЕРСНЫЕ КОЛЛОИДНЫЕ СИСТЕМЫ ВО ВНЕШНИХ УПРАВЛЯЮЩИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ**

Гурский К.Д., Демешко Г.М., Крючков Н.П.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия*

kruchkov\_nkt@mail.ru

Полидисперсность является типичной особенностью систем мягкой материи как природного так и искусственного происхождения, в качестве примеров можно привести системы бактерий и клеток, эмульсии, коллоидные системы, полимеры [1]. Различия в размерах частиц могут оказать значительное влияние на кинетику самосборки и результирующие структуры в системах мягкой материи с управляемыми взаимодействиями, индуцированными при помощи внешних переменных магнитных или электрических полей [2]. Однако, несмотря на то, что полидисперсные системы и управляемая самосборка достаточно активно исследовались по отдельности, случай их комбинации изучен слабо. Настоящая работа посвящена анализу кинетики самосборки двумерных коллоидных (или эмульсионных) систем во внешних управляющих вращающихся электрических полях.

В представленной работе проведено систематическое моделирование самосборки двумерной полидисперсной системы при помощи методов молекулярной динамики. Взаимодействие между частицами состоит из двух компонент: (i) ближнее контактное отталкивание частиц, описываемое в форме потенциала Вика–Чандлера–Андерсона, который близок по своей жесткости к потенциалу Дебая–Хюккеля в экспериментальных условиях [3]; (ii) изотропное дипольное притяжение в форме  $U = \epsilon \sigma_i^3 \sigma_j^3 / r^3$ , где  $\epsilon$  – параметр магнитуды взаимодействия, определяемый внешним полем,  $\sigma_{i,j}$  – диаметры взаимодействующих частиц. Размеры частиц задавались случайным образом в соответствии с распределением Гаусса с математическим ожиданием 1 и дисперсией от 0 до 0.2. Для расчета динамики частиц использовался термостат Ланжевена. В

рамках работы рассмотрены значения параметра  $\epsilon$  в диапазоне от 0.5 до 3, обеспечивающие самосборку кластеров. Затем применялся алгоритм фазового распознавания [4] для выделения кластеров и проводился расчет функций распределения частиц по размерам в зависимости от “глубины” нахождения в кластере. Пример распределения частиц по размерам для фиксированной “глубины” показан на Рис. 1.

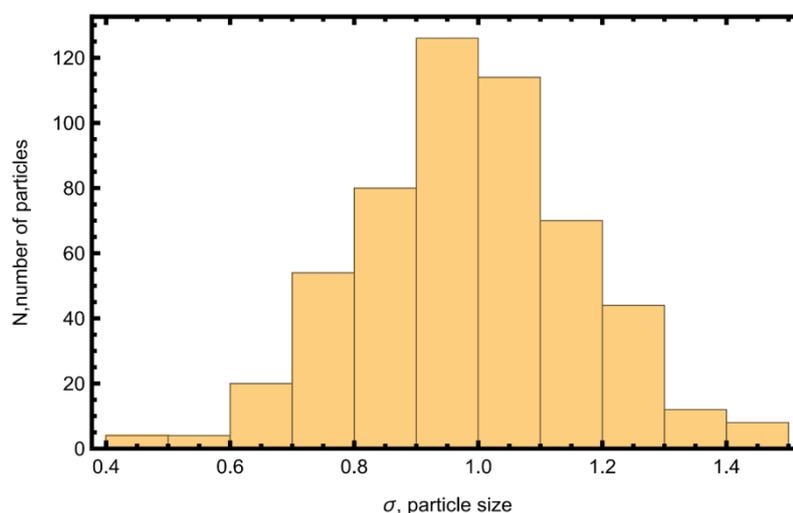


Рис. 1. Распределение размеров частиц в единичном слое

В результате анализа установлена особенность кинетики самосборки полидисперсных систем – меньшие и, соответственно, более легкие частицы в большинстве своем находятся у поверхности кластера, в то время как тяжелые частицы стремятся вглубь кластера.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ 20-72-10161 на базе МГТУ им. Н.Э. Баумана.

#### Литература

1. Lynd, N. A. et al., J. Progress in Polymer Science, V. 33, I. 9, P. 875-893, **2008**
2. Yakovlev E. V. et al, Scientific reports, **7**, 1, 13727, **2017**
3. Yakovlev, E. V. et al., J. Chemical Physics 151, 114502, **2019**
4. Kryuchkov, N. P. et. al, J. Physical Review E 107, 044601, **2023**

# КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ ДИНАМИКА В ПРИСУТСТВИИ МАГНИТНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ

С.В.Демишев

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991 Москва,  
ул. Вавилова, 38  
demis@lt.gpi.ru*

Квазиклассические уравнения спиновой динамики (уравнения Ландау-Лифшица, ЛЛ, и Гильберта, Г) играют исключительную роль в моделировании магнитного отклика магнитных наноструктур и решении различных задач спинтроники. Другой областью применения квазиклассической спиновой динамики являются сильно коррелированные электронные системы, для которых первопринципный расчет динамической восприимчивости оказывается исключительно сложным и был реализован лишь в ряде специальных случаев [1]. В настоящей работе рассматривается модификация квазиклассической спиновой динамики в присутствии флуктуаций намагниченности и локального магнитного поля, в том числе флуктуаций, имеющих квантовую природу [2]. Стандартный способ учета флуктуаций при рассмотрении квазиклассической спиновой динамики сводится к переходу к уравнениям типа Фоккера-Планка для вероятности направления намагниченности. При этом рассматривается объект, намагниченный до насыщения. В отличие от такого подхода, мы рассматриваем уравнения для усредненной осциллирующей намагниченности в области линейного магнитного отклика, которые имеет вид модифицированного уравнения ЛЛ или Г с эффективными параметрами, зависящими от амплитуды флуктуаций и их типа. Полученные уравнения применимы к расчету электронного парамагнитного резонанса в системах с сильными спиновыми флуктуациями. Показано, что учет магнитных флуктуаций оказывается принципиально различным для уравнений ЛЛ и Г, причем даже считающееся общепринятым формальное соответствие между этими уравнениями отсутствует. Установлено, что модифицированное уравнение ЛЛ наиболее полно соответствует качественной картине влияния флуктуационных эффектов на магнитный резонанс. Предсказан ряд новых эффектов, в частности возможность превышения интегральной интенсивностью линии ЭПР статической намагниченности в результате влияния квантовых флуктуаций. Показано, что в рассматриваемой модели возникает

универсальная связь между спин-флуктуационным вкладом в ширину линии ЭПР  $\Delta W$  и сдвигом g-фактора  $\Delta g$  вида  $\Delta W/\Delta g = ak_B T/\mu_B$ , где коэффициент  $a$  слабо зависит от магнитного поля и параметров материала. Установлено, что анизотропия спиновых флуктуаций приводит к спиновой динамике с эффективным анизотропным временем релаксации, для которой характерна сильная зависимость магнитных колебаний от направления линейно поляризованного микроволнового излучения в геометрии Фарадея [3]. В этом случае возникают специфические магнитные колебания, отличные от стандартного кругового вращения вектора намагниченности вокруг направления внешнего магнитного поля. В общем случае траектория конца вектора намагниченности представляет собой либо вытянутый квазиэллипс, положение главной оси которого зависит от величины внешнего магнитного поля, либо магнитные колебания могут приобретать почти линейный характер. Обсуждается применение предложенного модельного описания для объяснения результатов ЭПР экспериментов в системах с сильными электронными корреляциями ( $\text{CeV}_6$  [4],  $\text{MnSi}$  [5], легированный  $\text{CuGeO}_3$  [1,3]), а также для идентификации фаз со скрытым магнитным порядком и спин-флуктуационных переходов.

#### Литература

1. S.V. Demishev, Appl. Magn. Reson., **51**, 473, **2020**
2. S.V. Demishev, Doklady Physics, **66**, 187, **2021**
3. S.V. Demishev, A.V.Semeno, Appl. Magn. Reson., **53**, 1505, **2022**
4. S.V. Demishev, A.V.Semeno, H.Ohta, Appl. Magn. Reson., **52**, 379, **2021**
5. S.V. Demishev, et al., Pis'ma v ZhETF, **115** (11), 717, **2022**

### **МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ СВОЙСТВ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $\text{Ti}_3\text{Al}$ И $\text{Zr}_3\text{Al}$ СО СВЕРХСТРУКТУРОЙ $L1_2$**

Долгушева Е. Б.

*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,  
Россия, 426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, д. 34  
elena@udman.ru*

В рамках метода молекулярной динамики (МД) с много-частичными потенциалами межатомного взаимодействия [1,2],

проведены исследования термодинамических свойств упорядоченных интерметаллидов  $Ti_3Al$ ,  $Zr_3Al$  со структурой типа  $L1_2$ . В определении тепловых свойств решетки: теплопроводность, теплоемкость и тепловое расширение, важную роль играют колебания атомов. Особый интерес вызывают свойства соединений в колебательных спектрах которых имеется интервал частот с нулевым вкладом - «щель».

Результаты МД расчетов колебательных спектров и тепловых свойств интерметаллидов сравниваются с данными, полученными первопринципными методами [3,4].

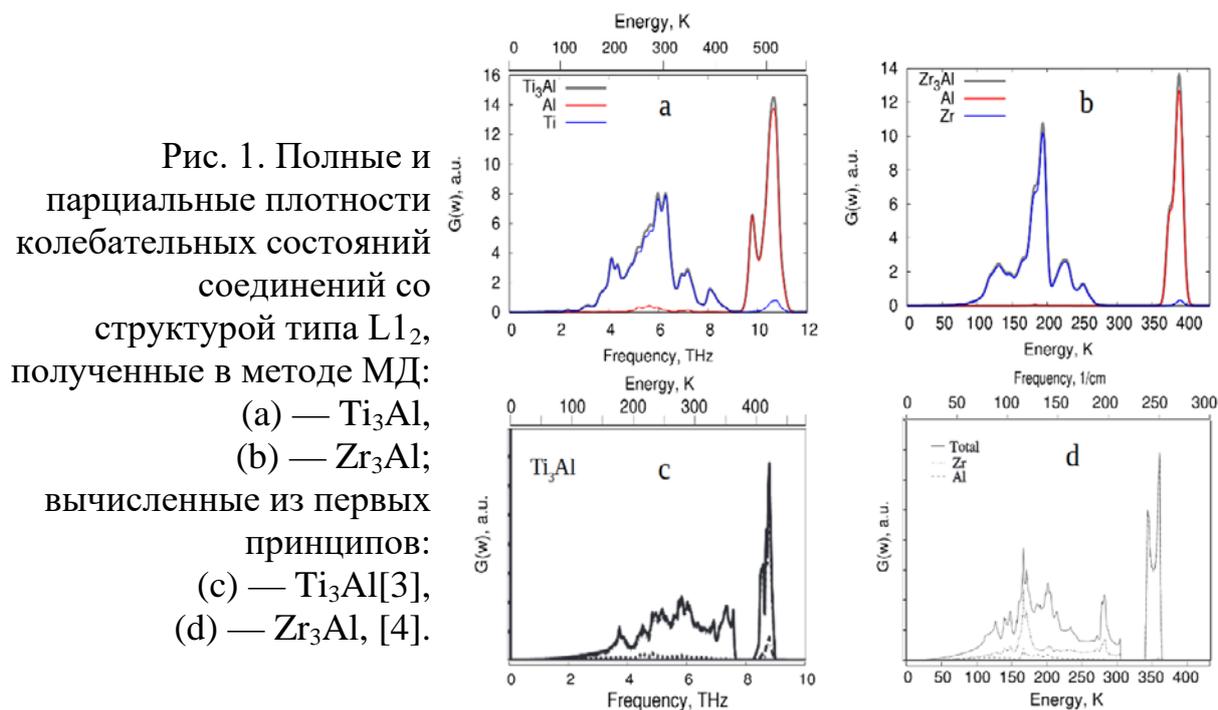


Рис. 1. Полные и парциальные плотности колебательных состояний соединений со структурой типа  $L1_2$ , полученные в методе МД: (a) —  $Ti_3Al$ , (b) —  $Zr_3Al$ ; вычисленные из первых принципов: (c) —  $Ti_3Al$ [3], (d) —  $Zr_3Al$ , [4].

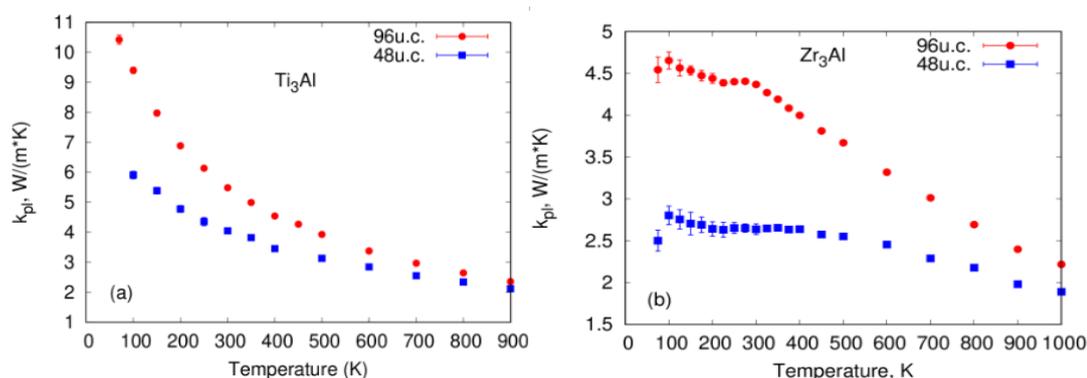


Рис. 2. Температурная зависимость решеточной теплопроводности  $k_{ph}(T)$ : (a) —  $Ti_3Al$ ; (b) —  $Zr_3Al$ . Кружками обозначены значения, полученные для кристаллитов длиной 96 у.с., квадратами — длиной 48 у.с.

Из рис.1 следует, что в обоих случаях спектры похожи по морфологии, имеют интервалы запрещенных значений частот.

Однако, если в  $Ti_3Al$  ширина «щели» сопоставима в расчетах обоими методами, то в системе с цирконием МД расчеты дают ширину «щели» примерно в 2,5 раза больше, чем первопринципные.

По схеме расчета, ранее протестированной на Al[5], проведены вычисления решеточной теплопроводности, основанные на методе неравновесной молекулярной динамики[6]. Построены графики температурной зависимости коэффициента решеточной теплопроводности структурированных интерметаллидов  $Ti_3Al$  и  $Zr_3Al$  для кристаллитов сечением  $12 \times 12$  и длинами 48 и 96 элементарных ячеек (у.с.). В системе  $Zr_3Al$  на графиках  $k_{pl}(T)$  наблюдаются «плато» в интервале температур  $200K < T < 300K$ , где коэффициент теплопроводности практически не изменяется. Предполагается, что эта аномалия связана с изменениями колебательного спектра атомов в области «щели». При увеличении температуры в титановой системе «щель» исчезает при 200K, а в цирконевой она наблюдается до 400K.

Расчеты выполнены с использованием кластера "Уран" СКЦ ИММ УрО РАН в рамках темы НИР УдмФИЦ УрО РАН № 121030100005-1.

#### Литература

1. R.R. Zope, Y. Mishin. Phys. Rev. B **68**, 024102, **2003**
2. H. Sheng <https://sites.google.com/site/eampotentials/Home/ZrAl>
3. N. Arikani, M. Ersen. Mod. Phys. Lett. B. **27**, 30, 1350224, **2013**
4. N. Arikani. J. Phys. Chem. Solids. **74**, 794, **2013**
5. Е.И. Саламатов, Е.Б. Долгушева. ХФМ, **23**, 4, 486, **2021**
6. F. Müller-Plathe. J. Chem. Phys. **106**, 14, 6082, **1997**

## АНАЛОГОВОЕ КВАНТОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЗАДАЧАХ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ И КВАНТОВОЙ ОПТИКИ

А.А. Елистратов

*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматизи-  
ки им. Н.Л. Духова, Росатом, Москва  
andrei.a.elistratov@mail.ru*

Развитие квантовых технологий, в частности квантовых вычислений, привело к возникновению таких инструментов исследования физических систем, как цифровое (алгоритмическое) квантовое моделирование и аналоговое квантовое моделирование.

Аналоговое квантовое моделирование (АКМ) – это направление исследований, в котором сложная и малодоступная для экспериментального наблюдения квантовая система заменяется более простой и контролируемой квантовой системой, имеющей качественно аналогичное поведение.

АКМ показало свою потенциальную эффективность во многих разделах физики – от физики конденсированного состояния до космологии. В физике конденсированного состояния это модель Хаббарда, спиновые модели, неупорядоченные и фрустрированные системы, спиновые стекла, сверхпроводимость, топологический порядок, метаматериалы, квантовые фазовые переходы.

В качестве квантовых систем, на которых осуществляется АКМ, чаще всего используются холодные атомы в оптических решетках, ионы в ловушках, фотоны в оптических процессорах, системы сверхпроводящих элементов, в частности, кубитов.

Первое из направлений АКМ, которым занимается наша исследовательская группа совместно с группой О. Астафьева, МФТИ – это системы искусственных атомов на основе кубитов-трансмонов для моделирования процессов в квантовой оптике. В частности, идет экспериментальное и теоретическое изучение волнового смещения на одиночном атоме и системе двух атомов. Для описания экспериментальных данных нами предложены как стандартный полуклассический подход с использованием управляющего уравнения на матрицу плотности, так и новый квантовый подход с использованием теории матрицы рассеяния.

Второе направление АКМ, к развитию которого мы приступили в сотрудничестве с научно-образовательным центром «Функциональные Микро/Наносистемы» МГТУ им. Н.Э. Баумана – это моделирование явлений в спиновых стеклах с использованием цепочки кубитов с искусственным разбросом параметров.

## **ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА САМОПРОДВИЖЕНИЯ РЫБОПОДОБНОГО МНОГОЗВЕННОГО ГИБКОГО РОБОТА**

Елистратова А. А.  
*НИЯУ МИФИ*

В настоящее время активно развивается мягкая робототехника – область, посвященная устройствам, содержащим гибкие элементы. Их

наличие позволяет сделать движение непрерывным и плавным. Эти свойства особенно важны при создании биоподобных роботов. В частности, данные технологии широко используются для воспроизведения движения водных животных, таких как рыбы, моллюски, медузы.

Наряду с преимуществами данного решения, существует несколько фундаментальных проблем, связанных с управлением устройством. Взаимное расположение элементов конструкции сильно зависит от внешних условий, в связи с чем для эффективного движения необходимо разработать модель, описывающую внешнее воздействие.

В данной работе было теоретически и экспериментально воспроизведено движение, характерное для живых рыб. Для вычислений была использована модель Т. Ву тонкой пластины, колеблющейся в потоке. Для теоретического определения положения точек тела под действием давления жидкости был использован метод псевдотвердого тела. В рамках работы было определено, как форма движения влияет на гидродинамические характеристики системы; оценено влияние вихреобразования на эффективность продвижения.

Для подтверждения полученных значений был создан гибкий робот, состоящий из двух силиконовых пластин и сервоприводов. Это простейшая конструкция, позволяющая реализовать S-образную форму движения при разных частотах. Экспериментально найдены значения тяги и средней скорости движения при различных режимах плавания. Исследована реакция гибких элементов конструкции на разные входные параметры. Определена мощность и КПД системы.

## **ВОДОРОД В ПОЛЫХ СИЛИКАТНЫХ НАНОСФЕРАХ**

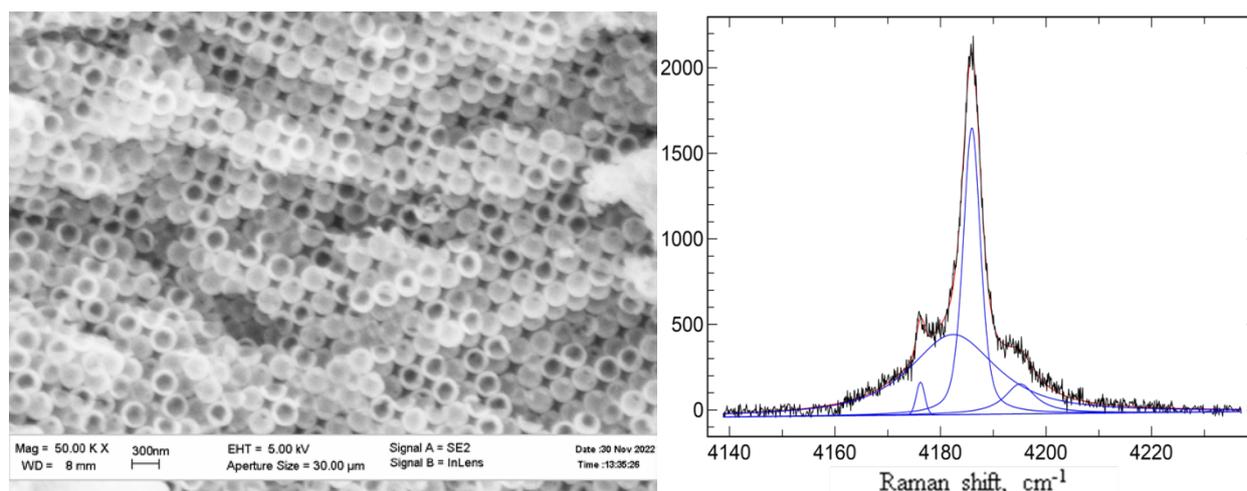
Ефимченко В.С., Короткова М.А., Мелетов К.П., Масалов В.М.,  
Суихина Н.С., Емельченко Г.А.

*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН*  
*efimchen@issp.ac.ru*

Размещение водорода в полых микросферах кварцевого стекла ранее предлагалась как один из возможных способов его хранения [1]. Помимо этого, различные дейтеросодержащие микросферы также предлагается использовать как топливные мишени в иницируемых лазером термоядерных реакциях [2].

Для того чтобы изучить возможность внедрения водорода внутрь полых кремнеземных и литий-силикатных наносфер и его последующее удержание при атмосферном давлении, было проведено их гидрирование при  $P=7.5$  ГПа и  $T=140$  °С. Для насыщения водородом использовались опаловые матрицы, состоящие из полых наносфер кремнезема и силиката лития диаметром 300 нанометров. На левой панели рисунка 1 показано изображение поверхности одной из таких матриц, состоящей из кремнеземных наносфер.

По данным термодесорбции, гидрированные наносферы содержали от  $X=0.72$  (силикат лития) до  $X=0.94$  (кремнезем) молей водорода на один моль вещества. В обоих случаях, выделение водорода происходило при температурах от  $T=-196$  до  $0$  °С. При хранении в жидком азоте количество растворенного водорода в кремнеземных полых наносферах уменьшилось до  $X=0.8$  в течение трех дней и в дальнейшем не изменялось.



*Рисунок 1. (Левая панель) Изображение поверхности опаловой матрицы из  $\text{SiO}_2$  наносфер во вторичных электронах. (Правая панель) Спектр комбинационного рассеяния полых  $\text{SiO}_2$  наносфер, насыщенных водородом при  $P=7.5$  ГПа и  $T=140$  °С. Черная линия— экспериментальный спектр, собранный при  $T=-190$  °С и атмосферном давлении. Синие линии показывают результат разложения экспериментального спектра. Красная линия изображает огибающую просуммированных синих линий.*

Спектры комбинационного рассеяния света, измеренные при температуре  $-190$ °С и атмосферном давлении показали, что водород в наносферах кремнезема и силиката лития находится в виде молекул. Часть спектра КРС, насыщенных водородом наносфер кремнезема в

области частот 4140–4240 см<sup>-1</sup>, показана на правой панели рисунка 1. Как видно из рисунка, линия вибрационных колебаний молекулярного водорода, содержит нескольких пиков с различной шириной и частотой. Мы предполагаем, что широкий пик с частотой 4181 см<sup>-1</sup> соответствует молекулярному водороду, растворенному в кремнеземной оболочке полый наносферы, а интенсивный узкий пик с частотой 4185 см<sup>-1</sup> соотносится с газообразным водородом, внедренным внутрь её полости.

Спектры комбинационного рассеяния света гидрированных литий-силикатных наносфер также содержали линии молекул водорода, находящихся в оболочке и полости наносферы. Помимо этого, эти спектры также содержали малоинтенсивные линии, соответствующие колебаниям Si-H и Si-OH связей.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 23–23–00426).

#### Литература

1. M. L. Schmitt, J. E. Shelby, M. M. Hall. *J. Non-Cryst. Solids*, **352**, 626, **2006**
2. Ю.А. Меркульев Миниатюрные критические массы термоядерного горючего и делящихся элементов // Препринт. ФИАН. **2010**. 136 с

## УДАРНОЕ ПЛАВЛЕНИЕ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ В ТИТАНЕ ПОСЛЕ УЛЬТРАКОРОТКОГО ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Жаховский В. В.<sup>1,2</sup>, Колобов Ю. Р.<sup>3</sup>, Ашитков С. И.<sup>2</sup>,  
Иногамов Н. А.<sup>4,1,2</sup>, Неласов И. В.<sup>3</sup>, Манохин С. С.<sup>3</sup>, Хохлов В. А.<sup>4</sup>,  
Ильницкий Д.К.<sup>1</sup>, Петров Ю. В.<sup>4</sup>, Овчинников А.В.<sup>2</sup>, Чефонов О.В.<sup>2</sup>,  
Ситников Д. С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики  
им. Н.Л. Духова Росатом, 127030 Москва*

<sup>2</sup>*Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва*

<sup>3</sup>*Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка*

<sup>4</sup>*Институт теоретической физики РАН, 142432 Черноголовка  
basilz@ya.ru*

Перспективной технологией обработки металлических материалов для технического и медицинского применения является

модификация их рабочей поверхности при поглощении импульсов энергии. Воздействие лазерными импульсами ультракороткой (пико- и фемтосекундной) длительности может быть использовано для микроструктурной модификации приповерхностного слоя на глубину порядка микрона, что ведет к повышению поверхностной твердости и износостойкости, увеличения сопротивления коррозии и улучшения других свойств материалов и изделий.

В фокусе нашего исследования процессы в титане, инициируемые поглощением мощного лазерного импульса с длиной волны 1240 нм и длительностью 110 фс. Поглощенная энергия  $5.5 \text{ Дж/см}^2$  распределяется в тонком поверхностном слое, что создает короткую ударную волну (УВ) амплитудой около 1 ТПа, которая идет в глубину гораздо быстрее теплопроводности в титане. Ударный нагрев и плавление происходит прямо во фронте УВ, бегущей со скоростью примерно 15 км/с, а затем расплав разгружается, остывает и кристаллизуется. Изменения в микроструктуре титана в этих процессах исследуются экспериментально, и анализируется с помощью гидродинамического и атомистического моделирования.

С использованием растровой и просвечивающей электронной микроскопии тонких пластин, вырезанных со дна кратера, мы обнаружили, что по глубине образуются два слоя модифицированного титана [1]. Быстрая кристаллизация слоя расплава, образованного в УВ скачке, формирует приповерхностный поликристаллический слой из наноразмерных зерен. В более глубоком слое, где ударное плавление стало невозможным из-за ослабления УВ, происходит пластическое деформирование титана с последующей рекристаллизацией, ведущей к формированию более мелких зерен, чем в исходном образце. Гидродинамические расчеты с использованием дислокационной модели также указывают на измельчение зерен до глубины, на которой УВ становится упругой.

Молекулярно-динамическое моделирование [1,2] монокристаллического образца титана показало, что УВ скачок даже после его ослабления ниже кривой плавления  $T_m(P)$  продолжает плавить. Огромное сдвиговое напряжение  $\sim 12 \text{ ГПа}$  в узком УВ скачке, которое соответствует критическому напряжению Френкеля для свободного скольжения атомных плоскостей, приводит к полному разрушению кристаллической решетки и образованию переохлажденного метастабильного расплава. Процесс холодного механического плавления был обнаружен ранее при моделировании стационарных УВ в монокристаллическом алюминии [3].

Образовавшийся расплав кристаллизуется в разгрузочном хвосте УВ до тех пор, пока его снижающаяся температура не пересечет  $T_m(P)$  из-за более быстрого падения давления. Позже кристаллизация приповерхностного слоя продолжится после постепенного стока тепла вглубь образца. После ослабления сдвигового напряжения в ударном скачке ниже критического холодное механическое плавление прекращается, и начинается пластическое деформирование решетки, а также возможная рекристаллизация через переходы  $\alpha \rightarrow \beta \rightarrow \alpha$  между фазами твердого титана. Модификация титана по глубине ограничена ослаблением УВ до упругого предела, после достижения которого образование новых дислокаций и дефектов упаковки прекращается.

Полученные экспериментальные и расчетные результаты хорошо согласуются и раскрывают базовые физические механизмы упрочнения поверхности металлов ультракороткими лазерными импульсами.

Авторы (В.В. Жаховский, С.И. Ашитков, Н.А. Иногамов, В.А. Хохлов, Д.С. Ситников) благодарят Российский научный фонд (грант #19-19-00697, продленный) за поддержку.

#### Литература

1. Н. А. Иногамов и др., Письма ЖЭТФ, **115**, 80, **2022**
2. V. V. Zhakhovsky et al., arXiv.org, **2023**
3. M. M. Budzevich, V. V. Zhakhovsky, C. T. White, I. I. Oleynik, Phys. Rev. Lett. **109**, 125505 (**2012**)

### ПОВЕРХНОСТНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В $\text{SmB}_6$ И $\text{Sm}_{1-x}\text{Yb}_x\text{B}_6$ ( $x \leq 0.1$ )

Журкин В.С.<sup>1</sup>, Божко А.Д.<sup>1</sup>, Анисимов М.А.<sup>1</sup>, Кудрявцев О.С.<sup>1</sup>,  
Шицевалова Н.Ю.<sup>2</sup>, Филипов В.Б.<sup>2</sup>, Глушков В.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАНУ,  
03142, Киев, Украина*

*dok5555@mail.ru*

Вырождение состояний иона самария с разным числом  $4f$ -электронов в  $\text{SmB}_6$  [1] приводит к нецелочисленной валентности  $\nu(\text{Sm}) \approx 2,5-2,6$  [2] и к сильным электронным корреляциям в  $4f$ - и  $5d$ -зонах, гибридизация которых, в свою очередь, инициирует открытие

щели в зонном спектре при  $T < 40$  К ( $\varepsilon_g \approx 19$  мэВ [3]). Однако, при  $T < 3$  К удельное сопротивление в  $\text{SmB}_6$  выходит на постоянные значения  $\rho \sim 10-100$  Ом·см (в пересчете на объемные единицы), нехарактерные для невырожденных полупроводников. Согласно модели коррелированного топологического изолятора (КТИ) [4] такая конечная проводимость в основном состоянии  $\text{SmB}_6$  может быть обусловлена поверхностными электронами с дираковским спектром, возникающими из-за нетривиальной топологии его зонной структуры. Доминирующий вклад поверхности в электронный транспорт при низких температурах подтверждается данными фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением [5-6] и эффектами нелокальной проводимости [7-8]. Поверхностные состояния в  $\text{SmB}_6$  сохраняются и при небольших концентрациях немагнитной примеси [9], рассеяние на которых подавляется из-за жесткой связи между спином и импульсом электрона.

В работе исследовано влияние ориентации и способа подготовки поверхности на электронный транспорт в  $\text{SmB}_6$  и твердых растворах замещения  $\text{Sm}_{1-x}\text{Yb}_x\text{B}_6$  ( $x \leq 0.1$ ). Монокристаллические образцы  $\text{SmB}_6$  и  $\text{Sm}_{1-x}\text{Yb}_x\text{B}_6$  ( $x \leq 0.1$ ) вырезались в форме параллелепипеда с гранями, ориентированными по основным кристаллографическим плоскостям (100), (110) или (111). Грани монокристаллов полировались на алмазном абразиве с последовательным уменьшением зернистости (вплоть до 0,3 мкм), после серии измерений образцы травились в водном растворе  $\text{HNO}_3$ . Для полированных и травленных образцов выполнялись измерения удельного сопротивления  $\rho$  и коэффициента Холла  $R_H$  при температурах 1.8-300 К в магнитных полях до 8 Тл.

Исследование поверхностей монокристаллических образцов методом атомно-силовой микроскопии показало, что шероховатость поверхности при полировке алмазным абразивом практически не зависит от ее ориентации, перепад высот рельефа не превышает 20 нм. Химическое травление увеличивает шероховатость поверхности, так для неполярных поверхностей (110) и (111) обнаруживается нерегулярный рельеф с перепадом высот рельефа более 100 нм, на полярных поверхностях (100) проявляются тетраэдрические кратеры микронного размера, глубиной порядка 150-200 нм и наклоном граней около  $9^\circ$ .

Сопоставление данных для образцов с полированными и протравленными гранями показало, что наибольшие различия параметров электронного транспорта наблюдаются в режиме поверхностной проводимости при  $T < 3,6$  К. В случае  $\text{SmB}_6$  травление

поверхности (100) приводит к росту  $\rho$  в 8 раз, а  $R_H$  – в 150 раз [12]. Схожее поведение наблюдается и для  $Sm_{1-x}Yb_xB_6$ , для которого значения  $\rho$  после травления поверхности растут в 16 раз при 1,9 К, а магнитосопротивление описывается отрицательным линейным вкладом  $\Delta\rho/\rho=VN^2$  с  $V=-1,76\cdot 10^{-3}$  кЭ<sup>-1</sup>. Необычное поведение транспортных свойств связывается с эффектами, вызванными изгибом зон под влиянием потенциала поверхности, а также с возможным изменением структуры спектра возбуждений топологического изолятора в режиме зарядовых флуктуаций.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-22-00990, <https://rscf.ru/project/22-22-00990/>

### Литература

1. Д.И. Хомский, УФН 129, 443 (1979).
2. M. Mizumaki et al., J. Phys.: Conf. Series 176, 012034 (2009).
3. B. Gorshunov et al., Phys. Rev. B 59, 1808 (1999)
4. M. Dzero et al., Phys. Rev. Lett. 104, 106408 (2010).
5. M. Neupane et al., Nat. Commun. 4, 2991 (2013).
6. N. Xu et al., Phys. Rev. B 88, 121102 (2013).
7. D.J. Kim et al., Sci. Rep. 3, 3150 (2013).
8. S. Gabani et al., Sol. St. Sci. 47, 17 (2015).
9. D.J. Kim et al., Nature Mater. 13, 466 (2014).
10. Z.-H. Zhu et al., Phys. Rev. Lett. 111, 216402 (2013).
11. S.V. Demishev et al., Sci. Rep. 8, 7125 (2018).
12. В. Глушков и др., Письма в ЖЭТФ 116, 770 (2022).

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ КОМПАКТНЫХ ПОРАЖАЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ**

Залозный В.А., Запорожченко Я. И., Красникова А.Г.  
*ФГУП «СКТБ «Технолог»*  
*Zar1992raz@mail.ru*

Средства поражения (далее – СФЗ) с использованием компактного поражающего элемента (далее – ПЭ) – это разновидность кумулятивных средств поражения, обеспечивающих дальнобойные кумулятивное действие, предназначенных для поражения бронированных целей, таких как танки, самоходные артиллерийские установки, боевые машины пехоты и

бронетранспортеры. В представленной работе рассмотрено моделирование процесса формирования компактных ПЭ с высоким относительным удлинением и стабилизацией на траектории благодаря развитой юбочной части.

ПЭ формируются из кумулятивных облицовок из высокоплотного сплава TaW10, обладающего высоким пределом прочности и относительным удлинением. Материалами снаряжения СФЗ были три взрывчатых состава: штатный состав окфол 3,5, широко используемый в современных ПТУР состав ПДТ и перспективный разрабатываемый состав ОТФ-1.

Для всех используемых в работе составов расчетным путем получены константы уравнения Джонса-Уилкинса-Ли. Константы получены на основании термодинамического подхода в программе, использующей уравнение состояния Беккера-Кистяковского-Уилсона по схеме предложенной в [1].

Проводилось численное моделирование работы СФЗ: процесса формирования ПЭ и внедрения ПЭ в стальную преграду толщиной превышающей калибр СФЗ. Результаты численного моделирования сравнивались с экспериментальными данными. Полученные результаты позволяют обосновать выбор материала снаряжения СФЗ.

#### Литература

1. Душенок С.А., Запорожченко Я.И. и др. Численное двумерное моделирование фугасного действия взрыва в воздухе различных ВВ массой 1-2 кг и экспериментальные данные / Физ.-хим. аспекты предельных состояний и структурных превращений в сплошных средах, материалах и технических системах: Вып. 2, **2018**.

### **ТРИ ИСТОЧНИКА И ТРИ СОСТАВНЫХ ЧАСТИ УСПЕШНОЙ НАУЧНОЙ ПУБЛИКАЦИИ**

Захарова Е. В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН*

<sup>2</sup>*Редакция журнала «Успехи физических наук»*

*elena.zakharova.office@gmail.com*

Публикация научных статей – важная составляющая деятельности научного работника. В современных условиях

существует объективная необходимость создавать большое количество материалов «отчетного характера», что, в результате, приводит к снижению качества публикаций. Тем не менее, для того, чтобы иметь возможность успешно работать, учёный должен стремиться к созданию таких произведений научной мысли, которые позволили бы донести важность и необходимость его исследований не только до его коллег, но и до различных структур, которые потенциально могли бы принять участие в финансировании этих исследований. При этом желательно, чтобы результаты его труда были бы востребованы научным сообществом еще долгие годы.

В докладе рассматриваются основные источники и необходимые условия успешной научной публикации. Подчеркивается важность компетентности автора статьи в той области, которую он освещает; осведомленность в новейших исследованиях в выбранной области знаний; ясное изложение материала, достаточная степень научной новизны исследования; значимость всех элементов статьи — от названия и аннотации до списка цитируемой литературы. Рассматриваются этапы подготовки и продвижения рукописи, а также продвижения статьи после публикации. Даются практические рекомендации по подготовке качественной научной публикации, в том числе и при работе с рецензией независимого рецензента, корректурой и другими важными этапами подготовки рукописи.

Автор выражает благодарность профессору С. В. Демишеву и к.ф.-м.н. М. С. Аксентьевой за полезные обсуждения.

## Литература

1. Е. В. Захарова, «Как написать высокорейтинговую статью и остаться в живых», в сб. ЛП Школа ПИЯФ и Молодежная конференция по физике конденсированного состояния, ФКС-2018, 12 – 17 марта 2018, Санкт-Петербург, Гатчина: НИЦ «Курчатовский институт» ПИЯФ, **2018**
2. Е. В. Захарова, С. В. Демишев, «Принципиальные вопросы оценки качества рукописи. Рецензент и автор: содружество или конфронтация», в сб. Научное издание международного уровня — 2018: редакционная политика, открытый доступ, научные коммуникации. Материалы 7-й международной научно-практической конференции, Отв. ред. О.В. Кириллова, **2018**

## СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ВЫСШЕГО БОРИДА ВОЛЬФРАМА

Зибров И.П., Филоненко В.П.

*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН*  
*zibrov@hppi.troitsk.ru*

В 1961 году вышла первая работа [1], посвященная синтезу и структуре высшего бориды вольфрама  $WB_4$ . В следующие несколько лет были опубликованы еще 3 статьи [2-4], посвященные этому соединению. В этих работах рассматривались не только различные модели структуры в рамках одной пространственной группы (П.Г.), но и разные П.Г.. При этом бор образовывал графеноподобные плоскости, а также димеры либо октаэдры. Дискуссии продолжились в 2000-е и 2010-е годы не только по поводу структуры, но и состава высшего бориды. В 2015 году вышла работа [5], в которой с использованием дифракции нейтронов были уточнены позиции как атомов W, так и B в рамках модели структуры в П.Г.  $R\bar{6}_3/mmc$ . Состав соединения  $WB_{4.2}$  из-за частичной занятости одной из 2-х позиций W и одной из 2-х позиций B, а бор образует графеноподобные плоскости между слоями атомов вольфрама и тримеры в слоях атомов вольфрама. Две теоретические работы [6,7], опубликованные в 2018 г., предсказали существование сверхтвердого бориды  $WB_5$ , имеющего псевдогексагональную ромбическую ячейку (П.Г.  $Pnmm$ ) и стабильного при давлении выше 1 ГПа. В структуре присутствуют треугольники из атомов бора в вольфрамовых плоскостях. Все вышеперечисленное явилось мотивацией для нас в проведении синтеза высшего бориды вольфрама в условиях высоких давлений и уточнения его структуры.

Синтез проводили при  $T=1000-1400$  С и  $P=1.5-7.0$  ГПа из смеси порошков состава  $W:B=1:7$ . Фазовый анализ образцов осуществляли на Imaging Plate Guinier Camera G670 фирмы Huber ( $Cu K\alpha_1$  излучение). Все образцы состояли из высшего бориды и  $WB_2$ . Для структурного анализа был выбран образец, содержащий 86%  $WB_{5-x}$  и 14%  $WB_2$ . Для сравнения различных моделей структуры с экспериментальными данными использовали полнопрофильный анализ (Rietveld refinement). Был проведен анализ нескольких десятков моделей структуры, 3 из которых показаны на Рис.1. Полнопрофильный анализ 2-х лучших моделей, наиболее близко соответствующих эксперименту, также показан на этом рисунке.

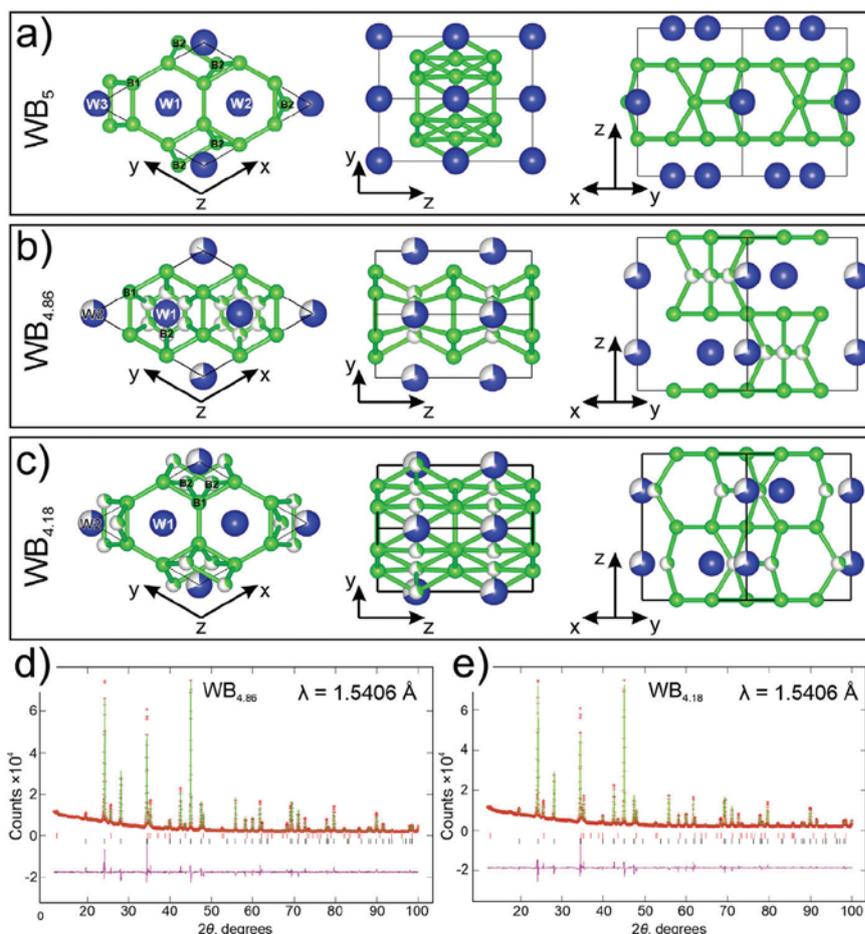


Рис.1. Модели структуры  $WB_{5-x}$ : а)  $P-6m2$ -  $WB_5$ ; б)  $WB_{4.86}$ ; в)  $WB_{4.18}$ . Уточнение структуры моделей в П.Г.  $P6_3/mmc$  д)  $WB_{4.86}$ ; е)  $WB_{4.18}$ . Экспериментальные точки (+), рассчитанная кривая (сплошная линия) и разность между измеренными и рассчитанными интенсивностями (нижняя кривая). Все возможные брэгговские рефлексы показаны вертикальными маркерами:  $WB_2$ -верхний ряд,  $WB_{5-x}$ -нижний ряд.

## Литература

1. A. Chretien, J. Helcorsky, C. R. Acad. Sci., **252**, 742, **1961**
2. P. A. Romans, M. P. Krug, Acta Cryst., **20**, 313, **1966**
3. H. Nowotny, H. Haschke, F. Benesovsky, Monatsh. Chem., **98**, 547, **1967**
4. T. Lindström, I. Rosenberg, J. Solid State Chem., **6**, 299, **1973**
5. A. T. Lech, C. L. Turner, R. Mohammadi, S. H. Tolbert, R. B. Kaner, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **112**, 3223, **2015**
6. A. G. Kvashnin, H. A. Zakaryn, C. Zhao, Y. Duan, Y. A. Kvashnina, C. Xie, H. Dong, A. R. Oganov, J. Phys.Chem. Lett., **9**, 3470, **2018**
7. C. Zhao, Y. Duan, J. Gao, W. Liu, H. Dong, D. Zhang, A. R. Oganov, Phys. Chem. Chem. Phys., **20**, 24665, **2018**

## ЛАЗЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ВЫСОКИЕ ДАВЛЕНИЯ

Иногамов Н. А.<sup>1-3</sup>, Жаховский В. В.<sup>2,3</sup>, Петров Ю. В.<sup>1,4</sup>, Хохлов В. А.<sup>1</sup>,  
Ашитков С. И.<sup>3</sup>, Ромашевский С. А.<sup>3</sup>, Ситников Д. С.<sup>3</sup>, Хищенко К.  
В.<sup>3-6</sup>, Колобов Ю. Р.<sup>5</sup>, Неласов И. В.<sup>5</sup>, Манохин С. С.<sup>5</sup>, Шепелев В. В.<sup>7</sup>

<sup>1</sup>*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН,  
142432 Черноголовка, Россия*

<sup>2</sup>*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л.  
Духова Росатом, 127030 Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия*

<sup>4</sup>*Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия*

<sup>5</sup>*Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

<sup>6</sup>*Южно-Уральский государственный университет, 454080 Челябинск, Россия*

<sup>7</sup>*Институт автоматизации проектирования РАН, 123056 Москва, Россия  
nailinogamov@gmail.com*

В очаге лазерного воздействия на исследуемую металлическую мишень легко создаются давления порядка 10 Мбар [1]. Это так, если действовать с помощью фемтосекундного лазера с облучением мишени через воздух нормального давления. Причем интенсивность излучения ограничена сверху оптическим пробоем воздуха. Такие режимы представляют интерес для практических приложений, поскольку не требуется помещения обрабатываемой лазером мишени/изделия в вакуумную камеру.

В смысле приложений, здесь речь идет о лазерной ковке. В технологиях лазернойковки лазерная вспышка и кратковременное повышение давления в поверхностном слое изделия приводит к улучшению характеристик изделия. Возрастает твердость, повышается сопротивление усталостному разрушению и коррозии.

Давления порядка 10 Мбар существенно превышают те, которые достижимы в алмазных наковальнях. Сжатие металла может сопровождаться полиморфным фазовым переходом, например, альфа-эпсилон переходом в случае железа [2] или переходом в омега или бета фазу в случае титана.

Экспериментальные измерения во время протекания ультракороткого импульса сложны. Хотя в принципе такие возможности имеются — pump-probe методики. Даже в случае применения таких методик, результаты носят косвенный характер. Поэтому для понимания результатов необходимо создание физических моделей и численное моделирование.

В работе приводится пример такого теоретико-численного подхода. Подход апробируется сверкой с данными наших опытов [3]. Лазерная ковка с помощью ультракоротких лазерных импульсов (УКЛИ) исследуется методами гидродинамического и атомистического моделирования, а также экспериментально [3]. Показано, что в отличие от традиционных наносекундных импульсов, УКЛИ позволяет поднять уровень создаваемых давлений на 2–3 порядка с 1–10 ГПа до 1000 ГПа (1ТПа). При этом физика явлений меняется принципиально,

Ударные волны (УВ) с давлениями, превышающими объемный модуль сжатия металла, плавят его. Впервые показано, что при давлениях  $\sim 1$  ТПа глубина ударного плавления на порядок превышает толщину слоя расплава за счет теплопроводности. Изучено возникновение, распространение и затухание [3,4] плавящей УВ в алюминии и титане. Затухание УВ позволяет модифицировать подповерхностный слой, в котором происходит смена режимов плавления от быстрого в УВ-скачке к медленному распространению фронта плавления в хвосте разгрузки за УВ.

Экспериментально показано, что при сверхбыстрой кристаллизации расплава формируется твердый слой со структурой, резко отличной от той, которая была до воздействия [3]. Измеренная глубина этого слоя хорошо согласуется с расчетом [3].

Авторы (С.А. Ромашевский, С.И. Ашитков, Д.С. Ситников - эксперимент и В.В. Жаховский, Н.А. Иногамов, В.А. Хохлов - теория и численное моделирование) благодарят Российский научный фонд (грант #19-19-00697, продленный) за поддержку.

## Литература

1. Н. А. Иногамов и др., Письма ЖЭТФ, **115**, 80, **2022**
2. S. A. Murzov et al., J. Appl. Phys., **130**, 245902, **2021**
3. В. А. Хохлов и др., Письма ЖЭТФ, **115**, 576, **2022**
4. V. V. Shepelev et al., Optics & Laser Techn., **152**, 108100, **2022**

## ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ОБРАЗОВАНИЕ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФАЗ В СПЛАВАХ AL-CU-(FE,CO)

Камаева Л. В.<sup>1</sup>, Бронникова Ю.И.<sup>1</sup>, Суслов А. А.<sup>1</sup>, Бражкин В. В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>УдмФИЦ УрО РАН

<sup>2</sup>ИФВД РАН

*lara\_kam@mail.ru*

Сплавы Al-Cu с добавками Fe или Co относятся к литейным сплавам, в которых сочетание прочности и пластичности обеспечивается формированием в Al матрице упрочняющих интерметаллидов. Поэтому возможности повышения механических свойств этих сплавов заключаются в управлении формой и составом интерметаллидов в процессе направленной кристаллизации. Также эти системы интересны образованием в них при 20-30 ат.% Cu и 10-20 ат.% Fe или Co равновесных квазикристаллических фаз, i-фазы в Al-Cu-Fe и d-фазы в Al-Cu-Co с икосаэдрическим и декагональным упорядочениями соответственно.

В работе проводится анализ микроструктур сплавов Al-Cu-Fe и Al-Cu-Co после их затвердевания при нормальном и высоком (до 8ГПа) давлениях. Исследования проводили в широкой области концентраций, включающих стехиометрические концентрации квазикристаллических фаз и области с эвтектической кристаллизацией, при различных условиях охлаждения расплава.

Термический анализ сплавов (дифференциально-термический анализ (ДТА) и дифференциальная сканирующая калориметрия) позволили построить концентрационные срезы тройных диаграмм состояния при 25,5 ат.% Cu (2,5-25 ат.% Fe), 5,8 и 12,5 ат.% Fe (15-40 ат.% Cu), а также при 15 ат.% Co (10-30 ат.% Cu) и 25 ат.% Cu (2,5 – 20 ат.% Co). Анализ термограмм охлаждения в условиях ДТА с небольшими (0,1-1К/с) скоростями охлаждения позволил определить условия образования i- и d-фаз при нормальном давлении.

Проведенные исследования показали, что в системе Al-Cu-Fe стехиометрия i-фазы совпадает с инвариантным равновесием в системе, 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  $\beta$ -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  $<1050^\circ C$  сплавы затвердевают в условиях небольших переохлаждений согласно диаграмме состояния (кристаллизация начинается с образования i-фазы). При увеличении температуры расплава характер затвердевания резко изменяется, в условиях больших переохлаждений (более  $60^\circ C$ ) кристаллизация протекает без образования i-фазы.

РСА и металлография сплавов, полученных при затвердевании в условиях высоких давлений, показали, что в области своей стехиометрии (25 ат.% Cu, 13 ат.% Fe) i-фаза также образуется по перитектической реакции, однако общий характер кристаллизации меняется. На первом этапе из расплава образуются фазы  $AlFe$  и  $Cu_3Al$ , которые сохраняются до комнатной температуры, при этом доля i-фазы значительно выше в сплаве, содержащем 15 ат.% Cu, чем при 25,5 ат.% Cu. При затвердевании сплавов с небольшим содержанием Fe в условиях высоких давлений квазикристаллическая фаза в их составе сохраняется до комнатных температур.

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

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СПИНОВОГО И АБРИКОСОВСКОГО ВИХРЕЙ В ДОПИРОВАННОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ

Капранов А. В., Акзянов Р. Ш., Рахманов А. Л.

*ВНИИА им. Н. Л. Духова*

*МФТИ*

*kapranov.av@phystech.edu*

Так называемые топологические сверхпроводники проявляют множество необычных свойств, которые представляются интересными для приложений в области спинтроники и квантовых вычислений. В частности, в этих материалах предсказано и экспериментально подтверждено существование возбуждений типа фермионов Майораны. В нашей работе мы предложили один из возможных способов создать фермионы Майораны в топологических сверхпроводниках [1]. В качестве конкретной системы, в которой реализуется топологическая сверхпроводимость, нами рассмотрены допированные топологические изоляторы типа  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . На основе этих материалов уже созданы высококачественные монокристаллы, в которых надежно установлено существование топологической сверхпроводимости с векторным нематическим параметром порядка.

В топологическом сверхпроводнике в режиме нематической сверхпроводимости в  $\text{Eu}$  представлении возможны различные типы вихрей. Первый тип связан с завихренностью в частично-дырочном пространстве и соответствует вихрю Абрикосова. Второй тип соответствует завихренности в спиновом пространстве и называется спиновым вихрем.

В данном докладе показано, что спиновой вихрь и вихрь Абрикосова притягиваются друг к другу и, как следствие, имеют общий кор. Они образуют аналог спин-массового вихря, существующий в жидком гелии. Используя уравнения микроскопической теории (обобщенные на случай топологической сверхпроводимости Боголюбова-де Жена) для изучения электронных состояний в нематическом сверхпроводнике со спиновыми вихрями [1]. Получено, что в случае спинового вихря существуют решения с нулевой энергией вблизи кора вихря и эти состояния можно идентифицировать как пары Майорана-Краммерса. В комбинированном вихре локализованных состояний с нулевой энергией нет [2].

Работа выполнена в рамках проекта РФФ №22-72-00032.

## Литература

1. R.S. Akzyanov, A.L. Rakhmanov Strain-induced spin vortex and Majorana Kramers pairs in doped topological insulators with nematic superconductivity, Phys. Rev. B. 104, 094511, **2021**
2. A.V. Kapranov, R.S. Akzyanov, A.L. Rakhmanov Interaction between spin and Abrikosov vortices in doped topological insulators, Phys. Rev. B 107, 134515, **2023**

## КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ И СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ

Капуткина Н. Е.<sup>1</sup>, Алтайский М. В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский технологический университет  
«МИСиС», г. Москва*

<sup>2</sup>*Институт космических исследований РАН, г. Москва*

<sup>1</sup>*kaputkina.ne@misis.ru*

<sup>2</sup>*altaisky@rssi.ru*

Исследования систем искусственного интеллекта активно развиваются в последнее время. В качестве элементной базы для квантовых вычислительных систем могут использоваться сквиды, ионные ловушки, полупроводниковые структуры. К преимуществам системы квантовых точек (КТ) для применения в системах обработки информации можно отнести масштабируемость технологии производства массивов КТ, миниатюрность отдельных элементов, низкое энергопотребление и отсутствие необходимости охлаждения до сверхнизких температур, а также возможность контролировать их состояние путем приложения внешних электрических и магнитных полей. Устанавливая оптические и электрические связи между КТ, можно контролировать корреляции между состояниями отдельных КТ. Взаимодействие между отдельными точками в массиве, выполненном на основе полупроводниковой гетероструктуры, осуществляется путем формирования экситонов и их взаимодействия с фононами гетероструктуры. Проводились численные исследования динамики двух- и трехкубитной квантовой системы на основе массива из квантовых точек, взаимодействующей с флуктуирующим окружением. Для массива из двух кубитов с диполь-дипольным

взаимодействием между ними и общим термостатом эволюция начального симметричного состояния приводит к равновзвешенной смеси трех симметричных состояний базиса Белла, не смешиваясь с синглетным состоянием. Для массива из трех кубитов аналогичные эффекты наблюдаются в квартетном состоянии. Когерентные осцилляции между различными квантовыми состояниями могут сохраняться вплоть до температур в несколько десятков градусов Кельвина. Наблюдаемый эффект перепутывания при слабом диполь-дипольном взаимодействии и сильной диссипации перспективен для массивов квантовых точек, работающих в качестве нейронных сетей и клеточных автоматов. Используя различные конфигурации связей, можно получить различные классификации пространства квантовых состояний трехкубитового регистра, т. е. реализовать классификационную функцию квантовой нейронной сети. Проводились численные и аналитические исследования эффективности обучения квантовых систем в присутствии термостата. Показано, что эффективное обучение возможно только в пределе классического обучения, когда изменение состояния обучающейся системы не приводит к существенному изменению состояния учителя.

#### Литература

1. M.V. Altaisky, N.N. Zolnikova, N. E. Kaputkina, V.A. Krylov, Yu.E. Lozovik, and N. S. Dattani *Photonics and Nanostructures — Fundamentals and Applications*, **24**,24, **2017**.
2. M.V. Altaisky, N.E. Kaputkina, and V.A. Krylov. *Physics of Atomic Nuclei*, **81**,792, **2018**.
3. M.V. Altaisky, N.E. Kaputkina, V.A. Krylov, *Physics of Particles and Nuclei Letters*, **16**, 911, **2019**.
4. M. Altaisky and N. Kaputkina, 2021 5th Scientific School Dynamics of Complex Networks and their Applications (DCNA), 2021, pp. 10-13, **2021**
5. Altaisky M.V., Kaputkina N.E. *Quantum Neural Networks and Quantum Intelligence*. In: Bandyopadhyay A., Ray K. (eds) *Rhythmic Oscillations in Proteins to Human Cognition*. *Studies in Rhythm Engineering*. Springer, Singapore. **2021**

## МАРТЕНСИТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ПОРИСТЫХ СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ TiNi ПОСЛЕ МОДИФИКАЦИИ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА ПУТЕМ ХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ

Кафтаранова М.И.<sup>1</sup>, Ходоренко В.Н.<sup>1</sup>, Аникеев С.Г.<sup>1</sup>, Арттюхова Н.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Томский государственный университет, Томск, Россия

*kaftaranovami@gmail.com*

Пористо-проницаемые сплавы на основе TiNi применяют в качестве эндопротезов в реконструктивной медицине. Разработаны новые методы лечения в хирургии, травматологии, стоматологии, ортопедии с использованием данных материалов. Их практическое использование требует глубоких исследований структурных особенностей, морфологии поверхности материала, характеристик мартенситных превращений (МП) и физико-механических свойств. Процесс взаимодействия тканей организма с имплантируемым устройством определяется морфо-химическими параметрами поверхности стенок пор. Пористый материал на основе TiNi, полученный методом СВС, имеет развитую трехмерную поверхность. Стенки пор содержат множество частиц  $Ti_2Ni$  и  $Ti_4Ni_2(O,N,C)$  [1]. Метод модификации поверхности путем химического травления СВС сплава из-за наличия открытых, взаимосвязанных пор и возможности доступа в поровое пространство является одним из наиболее перспективных методов для создания микропористой структуры поверхности стенок пор. В результате химического травления формируются микропоры, размер которых соответствует размеру вытравливаемых частиц. Однако любое изменение фазово-химического состояния материала отражается на проявлении мартенситных превращений. В связи с этим исследование влияния модификации поверхности путем химического травления на проявление мартенситных превращений в материале является актуальной задачей.

Пористые образцы получены методом СВС. Порошки Ti и Ni предварительно сушили в вакуумном шкафу при  $T=60-70^{\circ}C$  в течение 7 ч, затем бч смешивали в смесителе. Шихту засыпали в кварцевую колбу и уплотняли до пористости 45-50%. Колбу с шихтой устанавливали в реактор, нагревали до  $400^{\circ}C$ , инициировали СВ-синтез. Полученный сплав обрабатывали путем химического травления в растворах кислот: №1-HF (2 %) в течение 5 мин при  $T=20^{\circ}C$ , №2 - HF +  $HNO_3$  (1:3) в течение 2 сек при  $T=80^{\circ}C$ . МП

исследовали путем измерения удельного электросопротивления четырехточечным методом при поддержании постоянного тока, протекающего через образец.

Анализ кривых  $\rho(T)$  показал изменение температур МП, особенно в случае обработки составом №1. При использовании состава №1 происходит травление В2-фазы, ответственной за МП, и ее обеднение по титану, что приводит к снижению температуры начала прямого МП из В2→R. В случае применения состава №2 обеднения по титану В2-фазы не происходило и значение  $T_R$  осталось неизменным. Отличительной особенностью кривой  $\rho(T)$  после обработки составом №2 является выраженный переход В2→R. Кроме того, обработка составом №2 привела к расширению как прямого, так и обратного интервала МП.

Исследование выполнено при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет 2030).

#### Литература

1. S.G. Anikeev et.al., Mater. Res. Express. **6**, 026570, **2019**.

### **ВЗБИРАЯСЬ ПО СПИНОВЫМ ЛЕСТНИЦАМ В $\text{MoOBr}_3$**

Воробьева А.<sup>1,2</sup>, Комлева Е.<sup>3,4</sup>, Морозов И.<sup>1,2</sup>, Гайдорф М.<sup>1,2</sup>,  
Захаров К.<sup>1</sup>, Заикина А.<sup>3</sup>, Васильчикова Т.<sup>1,2</sup>, Овченков Е.<sup>1,2</sup>,  
Шванская Л.<sup>1,2</sup>, Стрельцов С.<sup>3,4</sup>, Васильев А.<sup>1,2</sup>, Волкова О.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский технологический университет  
МИСИС, Москва, Россия*

<sup>3</sup> *Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*

<sup>4</sup> *Институт физики металлов, Екатеринбург, Россия  
komleva.ev95@gmail.com*

Кристаллическая структура соединения  $\text{MoOBr}_3$  может быть представлена в виде набора ортогональных друг другу бесконечных лестниц атомов Мо (Рис. 1) [1]. Каждый ион Мо, в свою очередь, находится в октаэдре из четырёх атомов брома и двух атомов кислорода. С помощью первопринципных расчётов на основе теории функционала электронной плотности были обнаружены дополнительные (относительно ранее имевшихся структурных

данных) искажения: сонаправленные смещения атомов Мо из плоскости атомов брома в лестнице (соседние лестницы имеют противоположные смещения Мо).

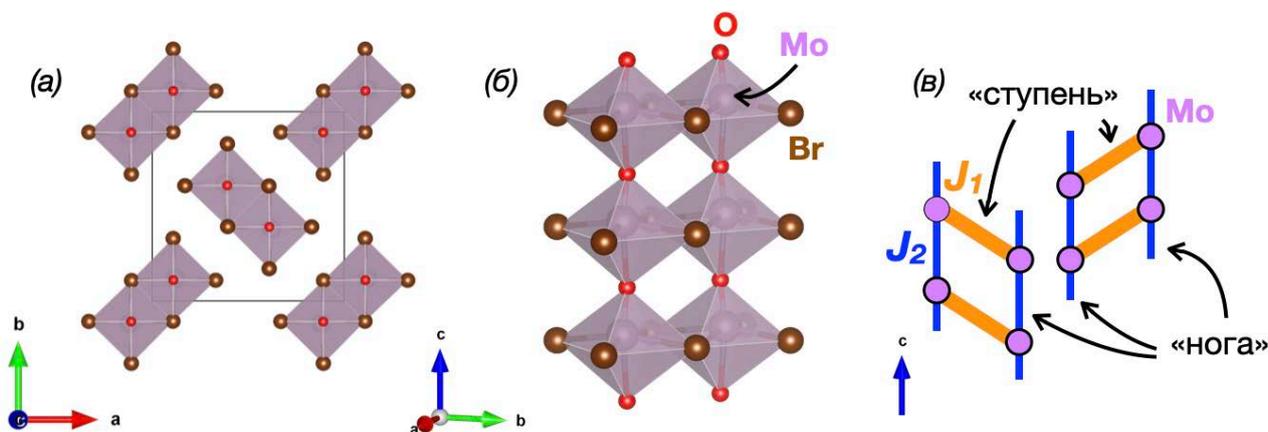


Рис. 1. Кристаллическая структура MoOBr<sub>3</sub>.

Температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости демонстрирует поведение, соответствующее доминирующему ферромагнитному обменному взаимодействию ( $\theta \sim 25$  К). Система упорядочена магнитно ниже  $T_N = 33$  К. Расчеты из первых принципов дают ферромагнитное обменное взаимодействие между атомами Мо в одной лестнице ( $J_1 = -10$  мэВ для «ступени» лестницы в случае октаэдров  $(\text{MoO}_2\text{Br}_4)^{3+}$  с общим ребром Br-Br и  $J_2 = -1$  мэВ для «ноги» лестницы — октаэдров  $(\text{MoO}_2\text{Br}_4)^{3+}$  с общей вершиной O). Это связано с механизмом сверхобменного взаимодействия через  $p$ -орбитали атомов Br. Магнитные моменты атомов Мо из соседних лестниц упорядочены антиферромагнитно с  $J_{inter} = 0,2$  мэВ.

Учёт спин-орбитального взаимодействия показал, что магнитные моменты ионов Мо лежат в плоскости плакетки из атомов Br.

Авторы благодарны российскому научному фонду за поддержку (проект РНФ 23-12-00159).

## Литература

1. M.G.B. Drew, I.B. Tomkins, The Crystal and Molecular Structure of Molybdenum (V) Oxytribromide, Acta Cryst. **B26**, 1161, 1970.

## СВОЙСТВА АЛМАЗНОЙ МЕТАПОВЕРХНОСТИ ИК ДИАПАЗОНА, СОЗДАННОЙ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ

Комленок М. С.<sup>1</sup>, Курочицкий Н. Д.<sup>1</sup>, Седов В. С.<sup>1</sup>, Клименко О. А.<sup>2,3</sup>,  
Дмитриева О. А.<sup>1,4</sup>, Тиходеев С. Г.<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>*Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии  
наук, Москва*

<sup>2</sup>*Сколковский институт науки и технологий, Москва*

<sup>3</sup>*Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,  
Москва*

<sup>4</sup>*Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва  
komlenok@nsc.gpi.ru*

Управление поляризацией и спектральными свойствами излучения в ИК диапазоне является важной задачей для различных практических приложений. Одно из окон прозрачности атмосферы располагается в интервале длин волн 8-13 мкм, в этом же диапазоне находятся линии поглощения колебательных переходов многих молекул, что дает возможность осуществлять мониторинг атмосферы. Кроме того, в среднем ИК диапазоне активно ведутся разработки мощных лазерных источников, для управления излучением которых требуется создание новой радиационно-стойкой оптики. Подходящим кандидатом для этой цели является алмаз, обладающий прозрачностью, лучевой стойкостью, химической инертностью и рекордной теплопроводностью. На основе алмаза разрабатываются волноводы в среднем ИК диапазоне, для структурирования поверхности которого используется довольно трудоемкий процесс травления в индуктивно-связанной плазме [1, 2]. Альтернативным методом обработки алмаза является метод реактивного ионного травления [3] или травление с помощью сфокусированного ионного пучка (FIB) [4]. В работе по созданию 2D фотонного кристалла использовалось лазерное излучение для рисования графитовых структур в объеме алмаза [5]. В данной работе предлагается использовать лазерное излучение для перфорации алмазной мембраны. Для ИК приложений необходимо использовать алмазные мембраны с апертурой около 1 мкм и толщиной 4–5 мкм, обеспечивающей распространение квазиволноводных мод в указанном выше диапазоне. Для этих целей в работе используется пленка нанокристаллического алмаза (NCD). Для создания сквозных

отверстий исследуются такие условия лазерного облучения, которые не вызывают растрескивание тонкой алмазной пленки. Оптические свойства полученных оптических элементов изучены с помощью ИК-спектрометра. В работе проводится сравнение экспериментальных спектров и смоделированных.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 22-22-00961).

### Литература

1. X. Wang, et al. Anal Chem, **86(16)**, 8136, **2014**
2. M. Malmström, M. Karlsson, P. Forsberg, Y. Cai, F. Nikolajeff, F. Laurell, Optical Materials Express, **6(4)**, 1286, **2016**
3. M. P. Hiscocks, K. Ganesan, B. C. Gibson, S. T. Huntington, F. Ladouceur, S. Praver, Opt Express, **16**, 19512, **2008**
4. P. Olivero, S. Rubanov, P. Reichart, B. C. Gibson, S. T. Huntington, J. Rabeau, A. D. Greentree, J. Salzman, D. Moore, D. N. Jamieson, S. Praver Adv Mater, **17**, 2427, **2005**
5. T. V. Kononenko, P. N. Dyachenko, V. I. Konov, Opt Lett, **39(24)**, 6962, **2014**

## ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ КЕРАМИКИ МАГНОНИОБАТА СВИНЦА

Королева Е. Ю.<sup>1</sup>, Соцкова Ю.Н.<sup>2</sup>, А.Молоков<sup>1</sup>, А.Г.Вакуленко<sup>2</sup>,  
Вахрушев С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ФТИ им. А.Ф.Иоффе

<sup>2</sup> СПбПУ Петра Великого  
*e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru*

Одним из ключевых моментов в физике релаксоров является их реакция на приложенное постоянное электрическое поле. В монокристалле магнониобата свинца (PMN) полярная сегнетоэлектрическая (СЭ) фаза реализуется только во внешних полях, причем приложенных только в определенных кристаллографических направлениях. Поэтому, вопрос возможности индуцирования полярной фазы в керамике PMN широко обсуждается.

Нам удалось индуцировать СЭ состояние в керамике в полях выше 3кВ/см. Получены петли гистерезиса, характерные для сегнетоэлектрического состояния.

Исследована полевая эволюция диэлектрических спектров керамики РМН на нескольких температурах в области максимума. Для описания релаксационных процессов использована функция Коула-Коула, позволяющая описывать процессы, уширенные по сравнению с Дэбаевским. Получены полевые зависимости параметров низкочастотного релаксационного процесса. Наблюдается уменьшение диэлектрической силы процесса  $\Delta\epsilon$  приблизительно в 2 раза при увеличении внешнего электрического поля. Кроме того, наблюдается ужесточение спектра времен релаксации,  $\tau$  уменьшается на 3 порядка при увеличении поля от 0 до 6 кВ/см. Сам спектр при этом сужается.

Проведено сравнение релаксационных процессов в керамике и монокристалле РМН. Обнаружено, что характер зависимостей не меняется, но наклон всех зависимостей для керамики меньше, чем для монокристалла. Наблюдаемые отличия в поведении керамики и монокристалла могут быть объяснены различной ориентацией зерен и влиянием границ.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №22-12-00328, <https://rscf.ru/en/project/22-12-00328/>.

## **ПЕРЕХОД ОТ НЕПРЯМОЙ К ПРЯМОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЕ В ТОНКИХ СЛОЯХ $\beta$ -InSe**

Котова Л.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>Университет ИТМО, Санкт-Петербург

*kotova@mail.ioffe.ru*

Активное развитие 2D-материалов привело к появлению нескольких классов слоистых материалов. Наиболее перспективными полупроводниками считаются дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) и монохалькогениды металлов III группы (М(III)X). ДПМ известны уникальными оптическими свойствами монослоев. В отличие от них, монослои М(III)X имеют непрямую запрещенную зону, которая с увеличением количества слоев переходит в прямую полосу. Параболическая дисперсия, характерная для объемных

M(III)X, в монослоях превращается в дисперсию «мексиканская шляпа». Однако, несмотря на значительный прогресс в изучении свойств и использовании этих материалов, точное количество слоев M(III)X, при которых происходит переход ширины запрещенной зоны от непрямой к прямой, не определено. Монослой имеет непрямую запрещенную зону типа «мексиканской шляпы», а после толщины  $\sim 10$  слоев она становится прямой зоной [1], однако точный момент перехода остается неизвестным.

Проведено экспериментальное исследование тонких слоев  $\beta$ -InSe для определения количества слоев InSe, при которых происходит переход к прямозонной структуре. Толщину исследуемых чешуек определяют с помощью атомно-силовой микроскопии. Использование низкотемпературной  $\mu$ -ФЛ позволило обнаружить толщину, при которой возникает фотолюминесценция, связанная с прямым межзонным переходом. Работу выхода и визуализацию изменения электронных свойств наноструктур на основе InSe исследовали с помощью Кельвин-Зондовой микроскопии. Показано, что момент появления фотолюминесценции соответствует скачку работы выхода при толщине 8 слоев. Таким образом, экспериментально установлен момент трансформации запрещенной зоны, что дает важную информацию для изготовления устройств на основе InSe.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант 21-12-00304).

#### Литература

1. Rybkovskiy D. V., Osadchy A. V., Obratsova E. D., Physical Review B. 90 (23) (2014) 235302.

### **ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ САМОСБОРКИ КВАЗИДВУМЕРНЫХ КОЛЛОИДНЫХ СТРУКТУР В УСЛОВИЯХ КОНФАЙНМЕНТА**

Кохановская А. В.<sup>1</sup>, Широкова А.А.<sup>1,2</sup>, Крючков Н. П.<sup>1</sup>, Яковлев Е. В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия

<sup>2</sup> ИФВД РАН, Калужское ш., д.14, Москва, Россия

yakov.egor@gmail.com, sashakv7@gmail.com

Исследования коллоидных суспензий открывают большие возможности в изучении молекулярно-подобных явлений (кристаллизации, плавлении, конденсации и т. д.), происходящих в

нано- и микрометровых масштабах. Преимущество системы микрочастиц в том, что ее можно регистрировать с помощью видеомикроскопии, что невозможно в системах атомов или молекул. Кроме того, в коллоидных системах возможна «настройка» взаимодействий между частицами при помощи внешних полей, в отличие от стандартных межатомных взаимодействий [1-3]. Таким образом, фундаментальные процессы такие как фазовые переходы, структурообразование, диффузия, теплопроводность и т.д., могут быть рассмотрены на уровне отдельных частиц [4-6]. Важным преимуществом использования внешних полей является возможность вместо частиц использовать биологические клетки, направленная самоорганизация которых лежит в основе перспективной технологии – биопринтинга.

Изучение процесса самосборки коллоидных суспензий во внешнем вертикальном магнитном поле в условиях конфайнмента является актуальной задачей в области мягкой материи. Ввиду того, что подобные системы ранее не рассматривались экспериментально, обнаруженные результаты носят уникальный характер. Эксперименты продемонстрировали многообразие возможных квази-двумерных структур, ранее недоступных в экспериментах с коллоидными суспензиями с настраиваемыми взаимодействиями.

В настоящей работе для этой цели использовались объемно наполненные оксидом железа суперпарамагнитные частицы полистирола, диспергированные в деионизированной воде. Суспензия помещалась в кювету между двух покровных стекол с гидрофобным покрытием, разделенных тонкой прослойкой, такой что высота между стеклами была меньше, чем два диаметра частиц. При внесении кюветы с образцом в вертикальное магнитное поле, микрочастицы поляризовались, и между ними в монослое появлялось взаимодействие – отталкивание. Но при достаточных значениях поля частицам выгоднее образовывать вертикальные структуры. Ввиду того, что вертикальный конфайнмент ограничивает возможность микрочастиц выстроиться друг над другом, микрочастицы образовывали структурные пары, где одна частица выше, а другая ниже. Такие системы в экспериментах образовывали змеевидные структуры (схематично изображены на вставке рис.1).

В результате работы путем изменения плотности суспензии и магнитуды магнитного поля были получены различные конфигурации систем микрочастиц (пример представлен на рис.1).

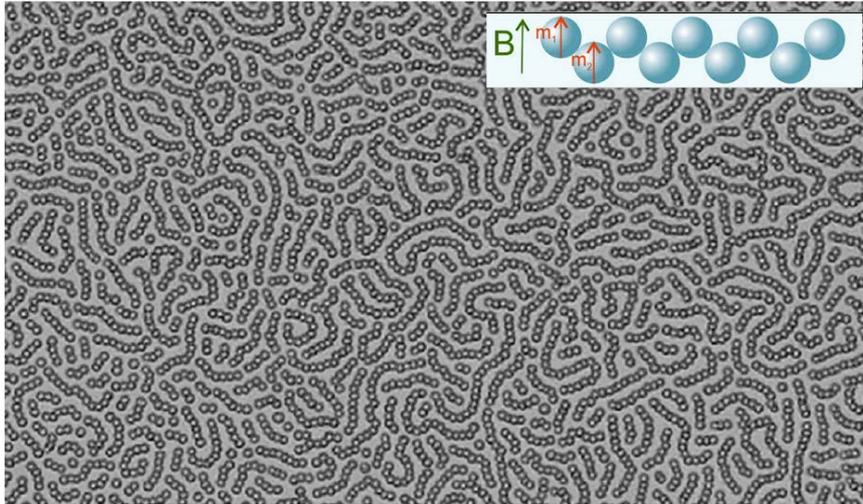


Рис.1. Змеевидные структуры в вертикальном магнитном поле с силой тока 1,55

Таким образом, понимание поведения частиц в данном состоянии расширит применение таких модельных систем для поисковых и технологических исследований в современных науках, а также для создания новых материалов.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФ № 22-72-10128 на базе МГТУ им. Н.Э. Баумана.

#### Литература

1. Yakovlev E. V. et al, Scientific reports, **7**, 1, 13727, **2017**
2. Yakovlev E. V. et al., J. Colloid Interface Sci., **608**, 1, **2022**
3. Li, D. D. et al., Comput. Part. Mech, **9**, 2, 315-333, **2022**
4. Du, D. et al, Soft Matter **13**, 8, 1548-1553, **2017**
5. Ryzhov V. N. et al., Phys.-Uspekhi., **60**, 9, 857, **2017**
6. Padidela U. K. et al, Phys. and Chem. of Liq., **58**, 5, 603-622, **2020**

### **ОЦЕНКА РАЗМЕРОВ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ОСТРОВОВ НА ФОНЕ ВОЛНЫ СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ В ОРГАНИЧЕСКИХ МЕТАЛЛАХ**

Кочев В. Д.<sup>1</sup>, Сеидов С. С.<sup>1</sup> и Григорьев П. Д.<sup>2,1</sup>

*1*Национальный исследовательский технологический университет  
«МИСИС», 119049, Москва, Россия

*2*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН  
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия  
*vd.kochev@misis.ru*

В высокотемпературных сверхпроводниках, и в частности в органических металлах, фаза волны зарядовой/спиновой плотности

(ВП) зачастую конкурирует со сверхпроводящей фазой (СП). В недавней работе мы проанализировали параметры пространственной фазовой сегрегации при переходе первого рода между СП и состоянием ВП в квазиодномерных металлах с несовершенным нестингом, характерным для органических металлов [1].

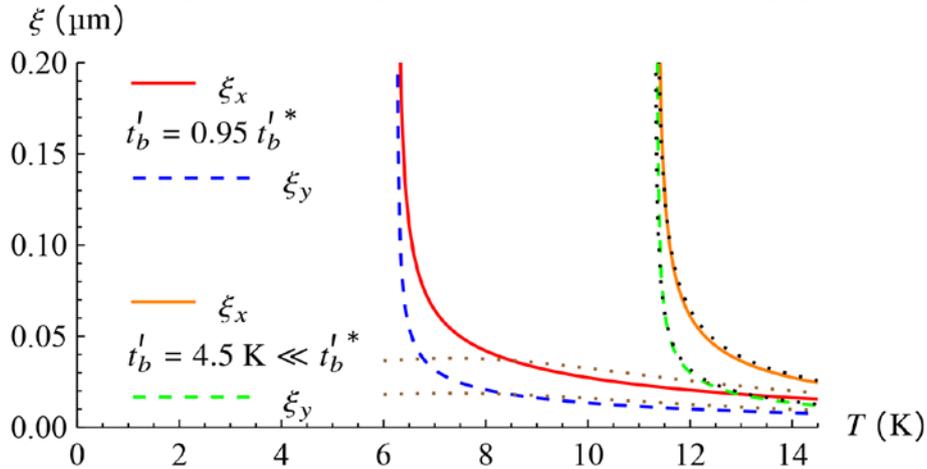


Рис. 1: Температурная зависимость длины когерентности ВП  $\xi$  вдоль двух главных осей ( $t'_b$  — параметр «антинестинга»). Зелёная и оранжевая линии соответствуют  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$  при нормальном давлении.

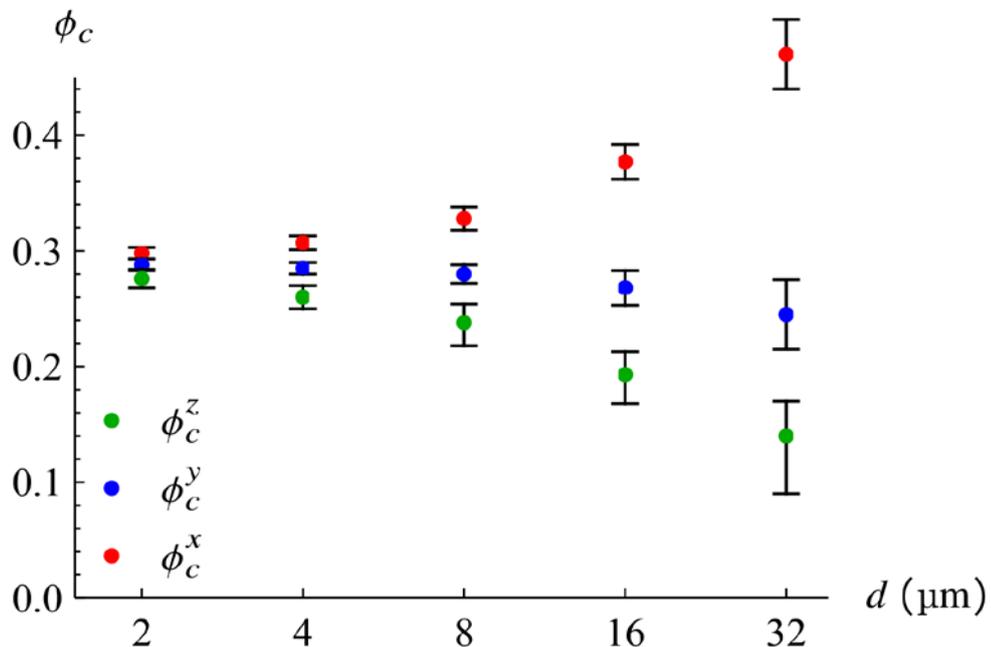


Рис. 2: Зависимость порога перколяции  $\phi_c$  по разным осям от размера СП острова  $d$  в  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ . Интервалы отвечают вероятности перколяции  $p \in (0.1, 0.9)$ . При  $d < 2$  мкм порог перколяции по всем осям сходится к известному изотропному порогу  $\phi_c \approx 0.2895$ , в то время как из эксперимента известно, что сверхпроводимость в  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$  зарождается анизотропно.

В рамках разложения Гинзбурга-Ландау по параметру порядка ВП мы получили аналитические формулы для температурной зависимости длин когерентности ВП вдоль главных осей. При  $T/T_c - 1 \approx 0.01$  для  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$  ( $T_c \approx 12.1$  К) наша оценка даёт  $\xi_x \approx 0.16$  мкм и  $\xi_y \approx 0.08$  мкм соответственно (см. рис. 1).

Грубая оценка нижней границы размера СП острова складывается из длин когерентности фаз СП и ВП, т. е.  $d_x \geq 2(\xi_{SC} + \xi) \approx 1$  мкм, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Эту оценку мы также подтвердили с помощью численного расчёта порога перколяции в модели СП островов внутри образца  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$  конечного размера (см. рис. 2).

Исследование выполнено при поддержке гранта К2-2022-025 в рамках федеральной программы Приоритет-2030.

### Литература

1. Vladislav D. Kochev, Seidali S. Seidov, and Pavel D. Grigoriev, [arXiv:2305.06957 \[cond-mat.supr-con\]](https://arxiv.org/abs/2305.06957), 2023.

## САМОСБОРКА ЦЕПОЧЕЧНЫХ СТРУКТУР В КОЛЛОИДНЫХ СИСТЕМАХ С УПРАВЛЯЕМЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

Крючков Н.П., Насыров А.Д., Шишков И.Н., Кохановская А.В.,  
Яковлев Е.В.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия*  
*kruchkov\_nkt@mail.ru*

Самосборка двумерных коллоидных систем при наличии регулируемых взаимодействий, индуцированных при помощи внешних электрических [1] или магнитных [2] полей, а также их комбинаций, является активно развивающейся областью физики мягкой материи. Наличие конфайнмента в системе может значительным образом сказаться на формирующиеся структуры при управляемой самосборке. Однако, несмотря на рост интереса к роли конфайнмента в свойствах различных систем [3,4], его влияние на управляемую самосборку изучено слабо. Настоящая работа посвящена изучению самосборки коллоидных частиц во внешнем управляющем поле в условиях жесткого квазидвумерного конфайнмента.

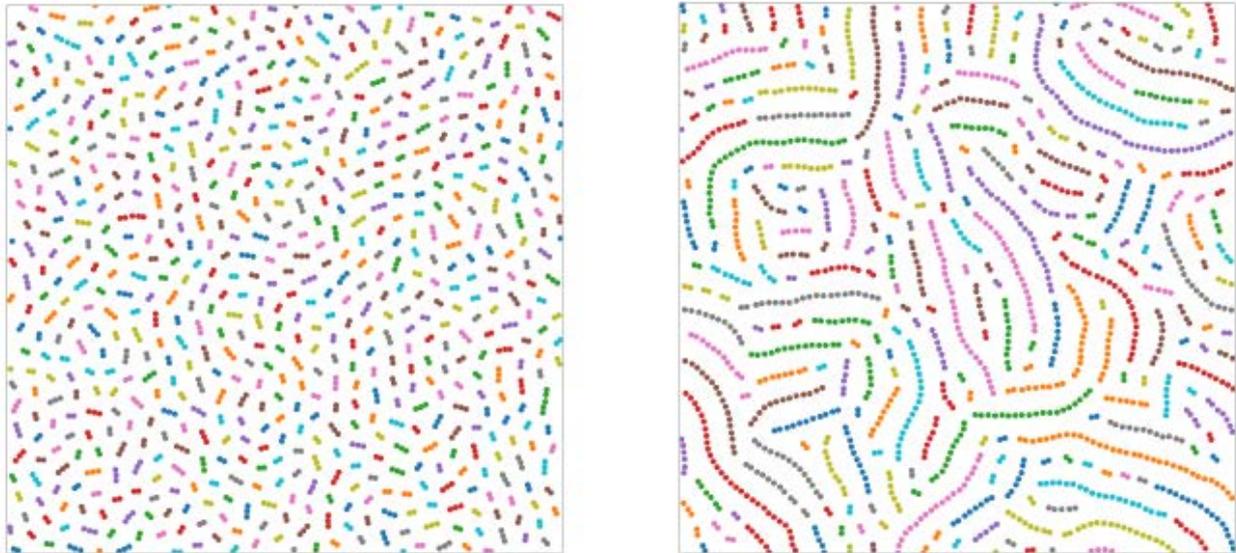


Рис. 1: Примеры структур, формирующиеся в условиях квазидвумерного конфайнмента при наличии управляемых взаимодействий

Проведено систематическое компьютерное моделирование системы частиц в условиях динамики Ланжевена методом молекулярной динамики. Контактное взаимодействие частиц в модели описывается потенциалом Вика-Чендлера-Андерсона, который является приближением модели твердых сфер [5] и близок по жесткости к потенциалу Дебая-Хюккеля в рассматриваемых экспериментальных условиях [6]. Для аппроксимации индуцированных взаимодействий всем частицам присваивался вертикальный дипольный момент  $p$ , который не изменялся во времени, а сами частицы взаимодействовали диполь-дипольным образом. Частицы системы размещались между двумя горизонтальными плоскостями, расположенными на расстоянии  $h$ , и взаимодействовали с ними по потенциалу Вика-Чендлера-Андерсона.

В рамках работы рассмотрены различные комбинации значений плотности системы, магнитуды индуцированных (диполь-дипольных) взаимодействий и значений ширины вертикального конфайнмента. Выявлено, что система демонстрирует достаточно богатый спектр структур и динамических режимов. Примеры структур, обнаруженные в моделировании показаны на Рис. 1. В результате пост-обработки были систематически рассчитаны зависимости различных характеристик системы, включая: энергии взаимодействия частицы-частицы и частицы-конфайнмент, диффузия, параметры  $\psi_4 \dots \psi_6$ , характерные размеры и закрученность цепочечных

структур. Это позволило оценить линии переходов между различными наблюдаемыми фазами.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-72-10161 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э. Баумана.

#### Литература

1. Yakovlev E.V. et al., J. Colloid Interface Sci. , 608, 564, **2022**
2. Snezhko A., Aranson I. S., Nature Materials 10, 698, **2011**
3. Nuno A.M.A., Soft Matter 19, 1695, **2023**
4. Xinyu Wang et al., Advanced Materials 30, 1705968, **2018**
5. J. Jover et al., JCP 137, 144505 **2012**
6. Yakovlev E.V. et al., JCP 151, 114502, **2019**

### **БАБОЧКА ХОФШТАДТЕРА: УРОВНИ ЭНЕРГИИ БЛОХОВСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ В ДВУМЕРНОЙ РЕШЕТКЕ И ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ. ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ (ОБЗОР)**

Ларионов И. А.

*Институт физики, Казанский (Приволжский) Федеральный  
Университет, г. Казань 420008, ул. Кремлевская 18  
E-mail: Larionov.MRSLab@mail.ru*

Бабочка Хофштадтера – фрактальная структура уровней энергии блоховских электронов в магнитном поле, перпендикулярном плоскости двумерной (2D) (изначально квадратной) решетки как функция доли магнитного потока через элементарную ячейку, была открыта Дугласом Хофштадтером в 1976 году [1]. Значения допустимых уровней энергии электрона на двумерной решётке как функции магнитного поля образуют структуру, ныне известную как фрактал и является одной из немногих реализаций фракталов в физике. Примечательно, что термин «фрактал» был введен Бенуа Мандельбротом в то же самое время [2,3]. Воздействие перпендикулярного магнитного поля на периодический электростатический потенциал приводит к самоподобному, рекуррентному, энергетическому спектру уровней Ландау 2D электронов, напоминающему бабочку. То есть распределение уровней энергии для малых масштабов магнитных полей рекурсивно

повторяет картину, наблюдаемую на крупном масштабе. Математическое описание спектра было частично разработано М. Я. Азбелем в 1964 году [4] на основе цепных дробей.

Экспериментально наблюдать бабочку Хофштадтера довольно сложно. Щели фрактального спектра велики, когда магнитный поток сравним с квантовым потоком, другими словами, магнитная длина  $l_B = (\hbar c / eB)^{1/2}$  того же порядка, что и период электростатического потенциала Блоха. Для реального кристалла такой период есть постоянная решетки, которая имеет порядок величины менее нанометра и для которой, следовательно, требуются чрезвычайно большие магнитные поля свыше 1000 Тл, что экспериментально в лабораторных условиях недостижимо. В 1990-х годах были получены электростатические потенциалы с намного большими периодами, чем постоянная решетки, порядка 100 нм, путем изготовления латеральных, литографически сформированных сверхрешеток для двумерного электронного газа в гетероструктурах GaAs/AlGaAs [5,6], в которых наблюдались признаки спектра Хофштадтера при транспортных измерениях.

Фрактальный спектр Хофштадтера был также наглядно реализован в микроволновом волноводе с периодическим расположением рассеивателей [7]. В этой фотонной системе матрица пропускания имитирует гамильтониан блоховских электронов в магнитном поле и также приводит к уравнению Харпера и фрактальной бабочке Хофштадтера. О подобной реализации гамильтониана Хофштадтера также сообщалось в оптических решетках с ультрахолодными атомами [8] и в сверхпроводящих кубитах [9].

Фрактальные спектры Хофштадтера можно наблюдать не только в квадратной, но и в гексагональной решетке, что было реализовано в гетероструктуре графен на гексагональной решетке бор-азот (hBN: graphene/hexagonal boron nitride (hBN) heterostructure) [10,11,12], при измерении (магнето-)сопротивления (проводимости) и емкости.

## Литература

1. D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B, **14**, 2239, **1976**
2. B. Mandelbrot, *Les objets fractals: forme, hasard et dimension*, Nouvelle bibliothèque scientifique, **1975**, ISSN 0768-1011
3. Benoît Mandelbrot, *Fractals: Form, Chance and Dimension*, W.H. Freeman and Co, **1977**; ISBN 0-7167-0473-0

4. М. Я. Азбель, ЖЭТФ, **46**, 929, **1964**
5. T. Schlosser, K. Ensslin, J. P. Kotthaus and M. Holland, Europhys. Lett., **33**, 683, **1996**
6. C. Albrecht, J.H. Smet, K. von Klitzing, D. Weiss, V. Umansky, and H. Schweizer, Phys. Rev. Lett., **86**, 147, **2001**
7. U. Kuhl and H.-J. Stöckmann, Phys. Rev. Lett. **80**, 3232, **1998**
8. M. Aidelsburger, M. Atala, M. Lohse, J. T. Barreiro, B. Paredes, and I. Bloch, , Phys. Rev. Lett. **111**, 185301, **2013**
9. P. Roushan *et al.*, Science **358**, 1175, **2017**
10. C. R. Dean *et al.*, Nature **497**, 598, **2013**
11. B. Hunt *et al.*, Science **340**, 1427, **2013**
12. L. A. Ponomarenko *et al.*, Nature **497**, 594, **2013**

## ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ НА МЕЖУЗЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЯХ В ЭЛЕКТРИДЕ $\text{Ca}_2\text{N}$

Мазанникова М. А., Шориков А.О., Коротин Д. М., Новоселов Д. Ю.  
*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*  
*E-mail: mazannikova@imp.uran.ru*

Электриды — это материалы содержащие электроны локализованные в межузельных периодически расположенных пустотах и не принадлежащие конкретным атомам. В двумерном электриде  $\text{Ca}_2\text{N}$  давление индуцирует структурные переходы из фазы с симметрией R-3m в Fd-3m фазу, а затем в I-42d, что сопровождается уменьшением размерности электридного подпространства с 2D-1D-0D соответственно. При этом экспериментальные измерения электрического сопротивления демонстрируют переход из металлической фазы в полупроводниковую, сопровождающийся коллапсом объёма [1]. Поскольку межузельные электронные состояния расположены в окрестности уровня Ферми и характеризуются значительным электрон-электронным кулоновским отталкиванием, приводящим к существенным корреляционным эффектам [2], то изменение степени их локализации может приводить к резкому изменению наблюдаемых свойств, включая транспортные, структурные и магнитные.

Для описания электронных состояний были построены функции Ванье (ФВ), локализованные в междоузлиях. Далее, путём решения полуклассических уравнений переноса Больцмана, были рассчитаны электронные транспортные свойства  $\text{Ca}_2\text{N}$ . Были получены

зависимости проводимости и коэффициента Зеебека от химического потенциала при  $T=300$  К (Рис. 1). Расчёты транспортных свойств показали, что структурные переходы под давлением сопровождаются падением проводимости (Рис. 1а), в соответствии с экспериментом [1]. Из графика зависимости коэффициента Зеебека от химического потенциала (Рис. 1б) видно, что 2D и 0D фазы имеют разные типы носителей заряда, а в 1D-фазе путём небольшого легирования электронами или дырками можно менять тип носителей заряда.

В полученном базисе ФВ был построен гамильтониан малой размерности. Решая данный гамильтониан с помощью DMFT и вводя дополнительное расщепление кристаллическим полем за счет искажения локального окружения электридных состояний при структурном переходе, был воспроизведён наблюдаемый в эксперименте переход между 1D и 0D фазами, а также качественно получен коллапс объёма. Кроме того, было обнаружено, что данный переход сопровождается спиновым переходом и резким уменьшением магнитного момента.

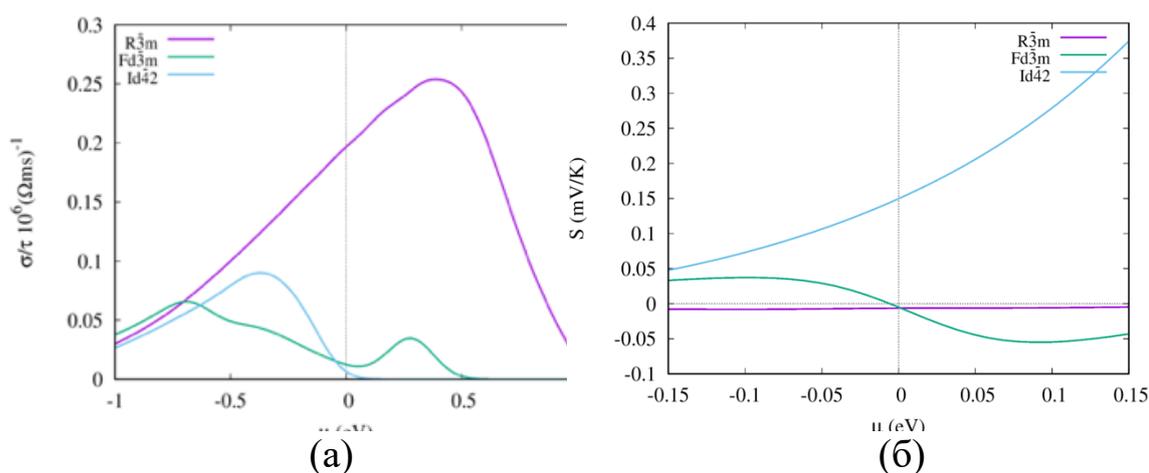


Рисунок 1. Зависимость проводимости (а) и коэффициента Зеебека (б) от химического потенциала для фазы с симметрией R-3m, Fd-3m и I-42d.

Таким образом, используя аппарат функций Ванье, показано, что межузельная электронная подсистема  $\text{Ca}_2\text{N}$  ответственна за падение электронной проводимости при структурных переходах под давлением, сопровождаемых понижением размерности электрида. Обнаружено, что механизм экспериментально наблюдаемого перехода металл-полупроводник при структурном переходе из 1D-фазы Fd-3m в 0D-фазу I-42d обусловлен корреляционными эффектами на межузельных электронных состояниях.

Работа выполнена при поддержке молодежного научного проекта ИФМ УрО РАН м 7-22.

## Литература

1. H. Tang et al., *Advanced Science* **5 11**, 1800666, **2018**.
2. D.Y. Novoselov et al., *The Journal of Physical Chemistry C*, **125 28**, 15724-15729, **2021**.

## МОДЕЛЬ БЕЗИНВЕРСИОННОГО ТЕРАГЕРЦОВОГО ЛАЗЕРА

Максимов Т. В.<sup>1,2</sup>, Курбаков И. Л.<sup>3</sup>, Лозовик Ю. Е.<sup>3,1,2</sup>

<sup>1</sup>*Федеральное государственное унитарное предприятие ВНИИА им. Духова, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Национальный физико-технический институт МФТИ, Долгопрудный, Россия*

<sup>3</sup>*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки ИСАН, Троицк, Москва, Россия*

Терагерцовое излучение занимает диапазон 0.1 – 30 ТГц (3 мм – 10 мкм). Излучение этого диапазона обладают удобными свойствами: имеет возможность проникать через большой набор материалов, таких как пластики, керамика, ткани; может проникать на некоторую глубину в органические материалы, и, в отличие от рентгеновского излучения, является неразрушающим. Оно обладает возможностью влиять на поведение коллективных мод полупроводников и детектировать химическую структуру газов, поскольку именно в этом диапазоне находятся спектры коллективных и колебательно-вращательных мод. Область терагерцового излучения называется «терагерцовым провалом», поскольку для низкочастотных методов получения излучения длина волны ТГц-излучения слишком мала, а для лазерных методов получения излучения частота ТГц-излучения слишком мала (тепловые флуктуации выше 7 – 10 К уничтожают инверсию заселенности) [1].

Одним из вариантов, как можно обойти эту проблему, является безинверсионное получение когерентного излучения при получении фотонного конденсата. Начало разработке темы фотонного конденсата положили эксперименты группы Клаерса, опубликованные в 2010-2011 годах [2]. Они накачивали полусферический резонатор, заполненный раствором красителя, оптическим лазером и наблюдали за характеристиками излучения фотонов из резонатора. Было показано, что при достижении

некоторой критической мощности накачки, распределение излучения менялось от стандартного теплового гауссова к явно заметному пиковому излучению, соотносящемуся с одной из мод основного состояния фотонов в резонаторе. Этот эксперимент показал экспериментальную возможность получения бозе-конденсата фотонов в оптическом диапазоне.

Мы предлагаем [3] использовать квази-2D электронный газ (2DEG) в перпендикулярном магнитостатическом поле для реализации перестраиваемого когерентного источника ТГц излучения на основе получения бозе-конденсата терагерцовых фотонов. 2DEG в перпендикулярном магнитном поле имеет дискретный эквидистантный энергетический спектр, что позволяет управлять резонансным поглощением и переизлучением фотонов электронами при относительно слабой накачке. Необходимое условие образования ВЕС - постоянство числа бозонов - может быть обобщено на время жизни бозона, которое должно быть намного больше времени его релаксации. При напряженности поля  $\sim 1-10$  Тл разность энергий между соседними уровнями Ландау в 2DEG находится в диапазоне ТГц. Это делает 2DEG эффективной средой для неупругого взаимодействия с фотонами ТГц и их термализации при сохранении числа терагерцовых фотонов. Этот процесс термализации обусловлен комбинационным рассеянием, при котором электроны переходят

между равноудаленными соседними уровнями Ландау, поглощая и испуская фотоны одной частоты, а фотоны неупруго рассеиваются, поглощаясь и тут же вновь испускаясь без изменения исходной частоты. Таким образом, квазиравновесное бозе-эйнштейновское распределение фотонов ТГц может быть установлено при постоянном числе фотонов и ненулевом химическом потенциале. Тогда, как только концентрация фотонов превысит критическую, в системе установится фотонный БЭК, где «эффективная масса бозона», определяемая поперечным размером резонатора, значительно меньше, чем массы иных бозонных квазичастиц. БЭК терагерцовых фотонов может быть источником когерентного терагерцового излучения.

## Литература

1. R. A. Lewis, «A Review of Terahertz Sources,» J. Phys. D: Appl. Phys., т. 47, р. 374001, 2014.

2. J.Klaers, J.Schmitt, F.Vewinger and M.Weitz, «Bose-Einstein condensation of photons in an optical microcavity,» *nature*, т. 468, p. 545, 2010.
3. T.V.Maximov, I.V. Bondarev, I.L. Kurbakov, and Yu.E. Lozovik, «Photon Bose-Condensate as a Tunable Terahertz Lase Source Without Inversion,» *Comm. Phys.* (to be publ.) ArXiv:2304.02174.

## **ФОТОГАЛЬВАНИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ: УПРАВЛЯЕМЫЕ СВЕТОМ МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ КВАНТОВЫЕ СОСТОЯНИЯ**

Мельников А.С.<sup>1,2</sup>, Миронов С.В.<sup>2</sup>, Буздин А.И.<sup>3</sup>, Путилов А.В.<sup>2</sup>,  
Пластовец В.Д.<sup>2,3</sup>, Токман И.Д.<sup>2</sup>, Беспалов А.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Московский Физико-технический Институт, Долгопрудный*

<sup>2</sup>*Институт Физики Микроструктур РАН, Нижний Новгород*

<sup>3</sup>*Universite de Bordeaux, Talence, France*

*melnikov@ipmras.ru*

В докладе планируется дать обзор некоторых особенностей фотогальванических эффектов в сверхпроводящих системах в сравнении с нормальными (несверхпроводящими) металлами. Будут обсуждены простейшие теоретические модели, позволяющие описать механизмы генерации фотоиндуцированных постоянных токов, магнитного момента и вихрей Абрикосова в сверхпроводниках и переключение сверхпроводящих токовых состояний под действием электромагнитной волны различной поляризации. Будет проанализирована связь фотогальванических эффектов с эффектом Холла в сверхпроводниках, особенностями неравновесной динамики сверхпроводящего конденсата и потенциала электронно – дырочного зарядового разбаланса в поле электромагнитной волны.

В частности, будет изложено теоретическое описание фотогальванических эффектов в сверхпроводящих конденсатах в рамках нестационарной модели Гинзбурга - Ландау (ГЛ). Рассматриваются различные варианты теории ГЛ, соответствующие как полностью бесщелевым сверхпроводникам, так и учитывающие конечную величину сверхпроводящей щели и сильную электрон - фононную релаксацию. Показано, что генерация постоянного тока и возникновение магнитного момента в поле электромагнитной волны различной поляризации (линейной или циркулярной) существенно

определяется мнимой частью константы релаксации в уравнении ГЛ. Для температур ниже критической температуры сверхпроводящего перехода рассмотрены следующие задачи: (а) генерация фотоиндуцированного постоянного тока в тонкой пленке и полупространстве в поле линейно поляризованной электромагнитной волны; (б) генерация второй гармоники в указанной геометрии; (в) генерация магнитного момента сверхпроводящего конденсата под действием циркулярно поляризованной электромагнитной волны (обратный эффект Фарадея); (г) задача о возникновении состояния с отличной от нуля полной завихренностью, знак которой определяется направлением вращения поляризации электромагнитной волны. Обсуждается связь с эффектом Холла в сверхпроводнике, особенностями гидродинамики сверхпроводящего конденсата, с механизмом Киббла - Зурека, отвечающего за генерацию флуктуационных пар вихрь - антивихрь, с результатами других групп по фотогальваническим эффектам во флуктуационном режиме выше критической температуры, а также в полностью нормальном (несверхпроводящем) состоянии.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 21-72-10161).

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯДРА ЗЕМЛИ

Валиулин В. Э.,<sup>1,2,3</sup> Михеенков А. В.,<sup>1,2,3</sup> Щелкачев Н. М.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики высоких давлений РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт

<sup>3</sup>РНИЦ «Курчатовский институт

*mikheev@bk.ru*

Доклад состоит из двух частей. Первая часть – краткий, и потому неизбежно поверхностный обзор современного понимания структуры Земли, в частности, ее ядра. Во второй изложены некоторые результаты численного моделирования ядра Земли.

В соответствии с современными представлениями об истории планет, Протоземля образовалась из межзвездного вещества (из более мелких космических тел ранней Солнечной системы, либо путем аккреции космической пыли). По достижении достаточного размера Протоземли гравитационный нагрев привел к плавлению ее вещества. Тяжелые компоненты (главным образом железо) и хорошо растворимые в них элементы стали тонуть в глубину, образуя ядро

Земли, остальное сформировало мантию и кору. Таким образом, базовые представления о составе ядра основаны на данных о распространенности химических элементов в межзвездном пространстве и на сравнении состава «свежих» метеоритов с составом верхних слоев Земли (см, например, [1]-[7]).

Задача же более детального определения состава ядра представляется нетривиальной.

Прямые экспериментальные данные о ядре малочисленны, это главным образом результаты сейсмических измерений. В принципе, сюда же можно отнести анализ аннигиляции космических нейтрино с антинейтрино, образующимися при бета-распаде калия-40 ядра Земли, но такие эксперименты только начинаются [8].

Лабораторное воспроизведение параметров ядра Земли – давление 150-350 ГПа и температура 4000-6000 К – вряд ли достижимо. Если по отдельности эти параметры еще можно получить в статическом варианте (причем по давлению – в алмазных камерах с ничтожным объемом образца), то их сочетание возможно лишь во взрывном эксперименте.

В таких обстоятельствах именно численные методы становятся решающими, причем это должны быть численные методы, способные корректно описывать многокомпонентные сплавы.

Ядро Земли, точнее, обе его части – жидкая внешняя и твердая внутренняя – имеет многокомпонентный состав. Главные элементы ядра: железо, его не менее 80% по массе, и никель, около 5%. Но наблюдается дефект массы ядра, по оценкам, оно легче чем образованное только железом, или железом и никелем.

Таким образом, в ядре необходимо присутствуют более легкие элементы. По-видимому, можно считать надежно установленным присутствие пяти – это сера, кремний, кислород, углерод и водород. Однако в литературе приводятся аргументы и в пользу других претендентов, чаще всего это азот, калий и магний.

Причем легкие элементы, присутствуя даже в незначительных количествах, могут существенно влиять на свойства ядра. Яркий пример – радиоактивный калий-40 (а, значит, и образующийся при его распаде кальций). Ясно, что наличие радиоактивного элемента может значительно изменить тепловой баланс Земли.

## Литература

1. Dziewonski, A.M., Anderson, D.L. *Phys. Earth Planet. Inter.* **25**, 297, 1981.

2. Hirose, K., Labrosse, S., Hernlund, J. *Annu. Rev. Earth Pl. Sc.* **41**, 657, **2013**.
3. Badro, J., Côté, A., S., Brodholt, J. P. *PNAS* **111**, 7542, **2014**.
4. Litasov, K. D., Shatskiy, A. F. *Russ. Geol. Geophys.* **57**, 22, **2016**.
5. Hirose, K., Wood, B., Vočadlo, L. *Nat. Rev. Earth Environ.* **2**, 645, **2021**.
6. Phạm, T.-S., Tkalčić, H. *Nat. Commun.* **14**, 754, **2023**.
7. Yuan, L., Steinle-Neumann, G. *Earth Planet. Sc. Lett.* **609**, 118084, **2023**.
8. Bezrukov, L. B., Karpikov, I. S., Sinev, V. V. arXiv:2304.02747, **2023**.

## МЕЖСЛОЕВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В СЛОИСТЫХ МЕТАЛЛАХ В УГЛАХ ЯМАДЖИ В СИЛЬНОМ И СЛАБОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Могилюк Т. И.<sup>1</sup>, Григорьев П. Д.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, 142432,  
Черноголовка, Московская область, Россия

Угловые осцилляции межслоевого магнетосопротивления – характерная черта сильно анизотропных слоистых проводников, дающие ценные сведения об их электронных свойствах. Угловые осцилляции магнетосопротивления часто используются для изучения таких слоистых материалов, как органические металлы [1–7], высокотемпературные сверхпроводники [8–12], гетероструктуры [13], интеркалированный графит, пниктиды и т. д. Угловые осцилляции магнетосопротивления впервые были обнаружены [14] в квазидвумерном сильно анизотропном органическом металле.

Первое объяснение [15] таких осцилляций основывалось на геометрических особенностях поверхности Ферми гофрированного цилиндра, соответствующего сильно анизотропной электронной дисперсии. Амплитуда квантовых осцилляций магнетосопротивления уменьшается в так называемых «углах Ямаджи», т. е. в максимумах угловых осцилляций магнетосопротивления. Для квадратичной изотропной внутрислоевой дисперсии электронов Ямаджи обнаружил, что минимумы межслоевой проводимости относятся к нулям функции Бесселя  $J_0(k_F d \tan \theta)$ ,  $k_F$  – внутрислоевой импульс Ферми,  $d$  – межслоевое расстояние,  $\theta$  – угол между приложенным магнитным полем и нормалью к проводящим плоскостям. Имея данные о минимумах межслоевой проводимости, можно оценить импульс Ферми слоистых металлов. С помощью выражений из

работы [16] нами найдены выражения для квантовых осцилляций межслоевой магнетопроводимости в углах Ямаджи для лоренцевой формы уровней, для самосогласованного борновского приближения и для приближения непересекающихся примесных линий.

Исследование выполнено при поддержке гранта и РФФИ № 21-52-12027.

### Литература

1. M. V. Kartsovnik, Chem. Rev. **104**, 5737, **2004**
2. J. Singleton, Rep. Prog. Phys. **63**, 1111, **2000**
3. M. V. Kartsovnik, V. G. Peschansky, Low Temp. Phys. **31**, 185, **2005**
4. T. Ishiguro, K. Yamaji, and G. Saito, Organic Superconductors, 2nd ed. (Springer-Verlag, Berlin, **1998**)
5. J. Wosnitza, Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals and Superconductors (Springer-Verlag, Berlin, **1996**)
6. J. S. Brooks, V. Williams, E. Choi et al, New J. Phys. **8**, 255, **2006**
7. The Physics of Organic Superconductors and Conductors, ed. by A. G. Lebed, Springer Series in Materials Science, **110**, **2008**
8. N. E. Hussey, M. Abdel-Jawad, et al, Nature (London) **425**, 814, **2003**
9. M. Abdel-Jawad, M. P. Kennett, et al, Nat. Phys. **2**, 821, **2006**
10. M. Abdel-Jawad, J. Analytis, et al, Phys. Rev. Lett. **99**, 107002, **2007**
11. M. P. Kennett, R. H. McKenzie, Phys. Rev. B **76**, 054515, **2007**
12. T. Helm, M. V. Kartsovnik, et al, Phys. Rev. Lett. **105**, 247002, **2010**
13. M. Kuraguchi, E. Ohmichi, et al, Synthetic Met. **133-134**, 113, **2003**
14. M. V. Kartsovnik, P. A. Kononovich, et al, JETP Lett. **48**, 541, **1988**
15. K. Yamaji, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 1520, **1989**
16. P. D. Grigorev, T. I. Mogilyuk, Phys. Rev B, **90**, 115138, **2014**

## **КРОССОВЕР ЖИДКОСТЬ-ЖИДКОСТЬ: КИНЕТИКА ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ**

Мокшин А. В., Власов Р. В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет  
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.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 19-12-00022).

## **ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРА ДЕМПИНГА НА ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ ВЫЗВАННОГО АКТИВНОСТЬЮ ЧАСТИЦ В УСЛОВИЯХ ДИНАМИКИ ЛАНЖЕВЕНА**

Насыров А.Д., Гурский К.Д., Крючков Н.П.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия  
nasyrovartur151998@gmail.com, kruchkov\_nkt@mail.ru*

Активная мягкая материя является быстро развивающейся областью физики, в центре внимания которой находятся системы самодвижущихся частиц, как биологического [1-2] (клетки, бактерии, млекопитающие), так и синтетического [3-6] (янус-частицы, микророботы) происхождения. Такие системы распространены в живой природе и имеют широкий спектр практического применения, в том числе в области медицины и материаловедения. Системы активной мягкой материи демонстрируют ряд характерных неравновесных явлений. Одним из наиболее изученных является фазовое расслоение, обусловленное активностью (MIPS, motility

induced phase separation) [7-9], при котором можно наблюдать распад системы на области с низкой и высокой плотностью даже если межчастичные взаимодействия являются чисто отталкивающими.

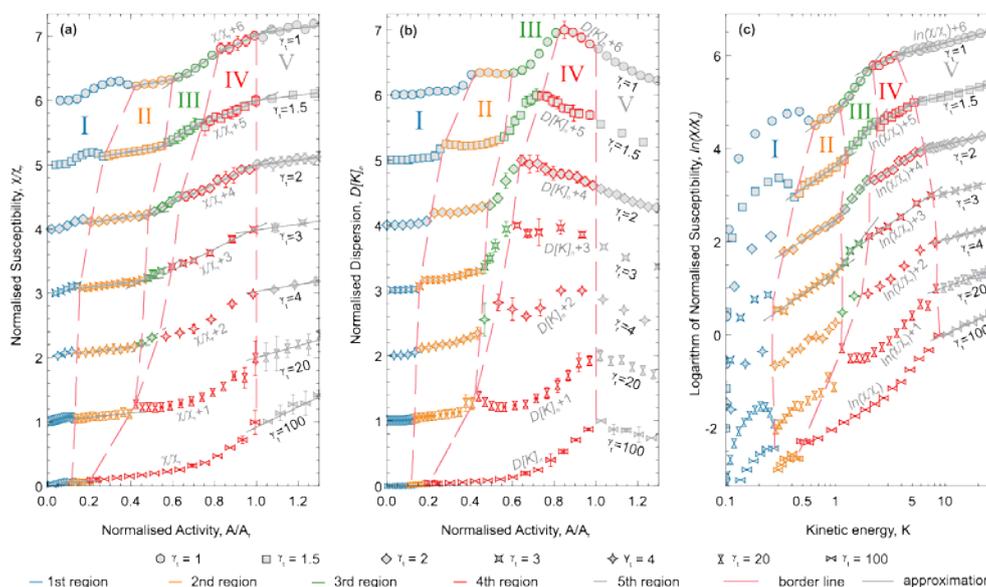


Рис. 1: (а) Зависимости нормированной восприимчивости кинетической энергии  $\chi/\chi_c$ , нормированной дисперсии кинетической энергии  $D[K]_n = D[K]/\max(D[K])$  и логарифма нормированной восприимчивости кинетической энергии  $\ln(\chi/\chi_c)$  для всех значений  $\gamma\tau$  [7].

MIPS хорошо изучен в случае броуновской динамики, в то время как случай Ланжевеновской динамики изучен слабо. В данной работе с помощью компьютерного моделирования исследуется возникновение MIPS и его эволюцию в двумерной системе активных частиц при изменении параметра демпинга. В качестве межчастичного взаимодействия используется чисто отталкивающий потенциал IPL12. Установлено наличие многостадийного сценария формирования MIPS. В процессе формирования MIPS можно выделить 5 областей с различными динамическими режимами, границы между которыми можно проследить на зависимости производной кинетической энергии системы по активности и дисперсии кинетической энергии Рис. 1. Обнаружено, что этот эффект наиболее устойчив в среднем диапазоне значений параметра демпинга, в то время как при малых значениях границы переходов сглаживаются, а при больших значениях параметра демпинга система стремится к броуновскому режиму, и регионы начинают схлопываться [7].

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ 20-72-10161.

## Литература

1. T. Vicsek and A. Zafeiris, Physics Reports 517, 71, 2012
2. R. Mayor and S. Etienne-Manneville, Nature Reviews Molecular Cell Biology 17, 97, 2016
3. B. Wang et. al, Advanced Materials 33, 2002047, 2020
4. A. K. Omar et al., ACS Nano 13, 560, 2018
5. D. Vilela et al., ACS Applied Materials & Interfaces 9, 22093, 2017
6. M. Z. Miskin et al., Nature 584, 557, 2020
7. Nikita P. Kryuchkov et al. Phys. Rev. E 107, 044601, 2023
8. S. Mandalet et al., Phys. Rev. Lett. 123, 228001, 2029
9. P. Digregorio et al., Phys. Rev. Lett. 121, 098003, 2018

## ТОПОЛОГИЧЕСКИ ЗАЩИЩЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ГЕЛИКОИДАЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ

Ниязов Р.А.<sup>1,2</sup>, Аристов Д.Н.<sup>1,2</sup>, Качоровский В.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ Курчатовский Институт – ПИЯФ, Гатчина

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,

Санкт-Петербург

*niyazov\_ra@npi.nrcki.ru*

Мы исследуем геликоидальный кристалл (ГК), основанный на туннельно-связанных краевых состояниях в двумерном топологическом изоляторе, состоящем из упорядоченных антиоточек (АТ). Схожие системы были исследованы в экспериментальной работе [1]. Транспорт в отдельной АТ был изучен ранее [2]. В данной работе модели рассматривалась модель 1D массива ГК, помещенного в магнитное поле [3].

Была рассчитана его зонная структура. Показано, что при целых и полужелтых значениях магнитного потока через АТ запрещенные зоны ГК закрываются, а при малом отклонении магнитного потока возникают массивные дираковские конусы (ДК). Ширина запрещенных зон зависит от различия осей квантования спинов электронов в соседних АТ, а расстояние по энергии между ДК можно контролировать затворными электродами.

При наличии дефектов в ГК, таких как стенки между областями колец с разными радиусами, возникают топологически-защищенные локализованные состояния (кубит). Их энергии лежат в середине

запрещенных зон массивных ДК. Расщепление между уровнями энергий кубита можно контролировать как магнитным полем, так и чисто электрически. Такие состояния могут быть использованы для квантовых вычислений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-12-00147-П)

#### Литература

1. J. Ziegler, PhD thesis, Regensburg University, **2019**
2. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Yu. Kachorovskii, *npj Computational Materials* **6**, **2020**
3. R. A. Niyazov., D. N. Aristov, V. Yu. Kachorovskii, *arXiv:2305.08242*, **2023**

### **ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВАЯ ОБРАБОТКА ПОРОШКОВОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА**

Пахолкина С.А., Анিকেев С.Г., Артюхова Н.В., Ходоренко В.Н.,  
Кафтаранова М.И., Мамазакиров О.

*Национальный исследовательский Томский государственный  
университет, Томск, Россия  
pakholkina200362@gmail.com*

**ВВЕДЕНИЕ.** Сплавы на основе TiNi обладают эффектом памяти формы, сверхэластичности за счет реализации мартенситных превращений. Биомеханическая совместимость обеспечивается диссипативными потерями энергии при мартенситных превращениях, а биохимическая совместимость обеспечивается слоем оксида титана [1-4]. Пористый материал на основе никелида титана является наиболее перспективным для реконструкции костных тканей организма, за счет развитой объемной пористой структуры и проницаемости.

Долговечное применение в медицине изделий из TiNi может быть ограничено из-за реализации коррозионных процесса: структурной (в местах локализации частиц вторичных фаз) и питтинговой коррозии (воздействующая на материал в местах выступов и впадин). Одним из способов удаления частиц с поверхности металлических материалов является обработка их поверхности низкоэнергетическим (10-30 кэВ) сильноточным (10-25 кА) электронным пучком (НСЭП). Исходя из

этого, целью данной работы является изучение влияния электронно-пучковой обработки на структуру порошкового материала на основе никелида титана.

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ.** Для исследования использовался порошок никелида титана (TiNi), полученный методом гидридно-кальциевого восстановления марки ПВ–Н55Т45. Диапазон размеров частиц порошка составил 0-100мкм. Электронно-пучковую обработку полученных заготовок проводили с длительностью импульса 2-4 мкс. Образцы облучались при высокой энергии электронов, равной 30 кэВ, при этом плотность энергии составляла  $E=6 \text{ Дж/см}^2$ , количество импульсов обработки равно 30. Изучение макро- и микроструктуры проводили методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) на системе с электронным и сфокусированным ионным пучками Quanta 200 3D. Элементный состав фаз определяли с помощью энергодисперсионного спектрометра EDAX ECON IV.

**РЕЗУЛЬТАТЫ.** Показано, что электронно-пучковая обработка порошкового сплава TiNi, полученного методом гидридно-кальциевого восстановления, приводит к формированию более однородной структуры поверхности материала по сравнению с исходной макро- и микроструктурой. Воздействие электронным пучком приводит к плавлению поверхностных слоев толщиной 10-15 мкм, поэтому отмечается изменение морфологии поверхности отдельных частиц порошка. Наблюдается перенос вещества вследствие диффузии атомов по поверхности от выпуклых участков к вогнутым поверхностям перешейка, что выражается в сглаживании рельефа поверхности и залечивании дефектов (поры, трещины). Обнаружено растворение частиц вторичных фаз  $Ti_2Ni$  и  $Ti_4Ni_2(O, N, C)$  в процессе перекристаллизации. Это должно положительно повлиять на коррозионные свойства материала, так как данные частицы являются источниками питтинговой коррозии при знакопеременных нагрузках в агрессивных средах, к которым относятся тканевые жидкости организма человека.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-79-10045

Литература:

1. Гюнтер, В. Э. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы: в 14 томах / В. Э. Гюнтер, В. Н. Ходоренко, Т. Л. Чекалкин и

- др.; под ред. В. Э. Гюнтера. – Томск: Изд-во «МИЦ», 2011. – Т. 1. – 534 с.
2. Структура, фазовые превращения и свойства. Авторы: под ред. В.Г. Пушина Информация о издательстве: Екатеринбург: УрО РАН, 2006. – 414 с.
  3. Итин, В. И. Высокотемпературный синтез интерметаллических соединений. / В. И. Итин, Ю. С. Найбороденко – Томск: Изд-во ТГУ, 1989. – 214 с.
  4. Otsuka, K. Physical metallurgy of Ti–Ni–based shape memory alloys / K. Otsuka, X. Ren // Progress in materials science. – 2005. – Т. 50. – No. 5. – С. 511–678

## **МЕХАНИЧЕСКИЕ И ДЕМПФИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА ОБЪЕМНО СТРУКТУРИРОВАННОГО АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АК6, СИНТЕЗИРОВАННОГО СЕЛЕКТИВНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ПЛАВЛЕНИЕМ**

Петрова А.Н.<sup>1</sup>, Бродова И.Г.<sup>1</sup>, Кленов А.И.<sup>2</sup>, Пильщиков А.А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского  
отделения Российской академии наук*

<sup>2</sup>*Российский Федеральный Ядерный Центр - Всероссийский научно-  
исследовательский институт технической физики имени академика  
Е.И. Забабахина*

<sup>3</sup>*Снежинский физико-технический институт Национального  
исследовательского ядерного университета «МИФИ»  
petrova@imp.uran.ru*

В настоящее время активно ведутся работы по освоению аддитивных технологий для изготовления деталей сложной конфигурации из сплавов на основе алюминия применительно к новым изделиям машиностроения. Наиболее распространенным методом аддитивного производства является селективное лазерное плавление (СЛП). Важным преимуществом материала, полученного методом СЛП, является возможность достижения заданных свойств за счет управления его структурным состоянием с помощью как параметров синтеза, так и последующей термической обработки. Известно, что материалы, полученные методом СЛП, значительно отличаются по структуре от слитков, полученных традиционными методами. Такое различие связано с высокими скоростями

кристаллизации при СЛП, а последующая термическая обработка может приводить к формированию структуры, не типичной для аналогичного термически обработанного сплава, полученного традиционными способами литья и обработки давлением.

Для защиты конструкций от воздействия динамических нагрузок целесообразно использовать высокопористые материалы. Одним из вариантов создания пористых структур является создание сетчатой структуры методом СЛП.

В работе исследованы структура и динамические свойства сетчатых образцов Al-Mg-Cu-Si сплава, синтезированных методом СЛП на 3D принтере по металлу Realizer SLM100. Контролируя режимы синтеза, получены образцы разной плотности в диапазоне 700-1900 кг/м<sup>3</sup>, с различной объемно-периодической структурой, а именно, с кубической ячейкой, а также топологии типа героид с различным соотношением размера ячейки и толщины стенки. Определено, что при мощности лазера P=200 Вт и скорости сканирования 400 мм/с в сплаве формируется оптимальная структура с минимальной дефектностью. Для сетчатых образцов важным параметром также является толщина слоя порошка при 3D печати. Исследовано влияние параметров синтеза, направления синтеза, геометрии построения, плотности сетчатого материала на динамические механические свойства сплава в диапазоне скорости деформации 10<sup>2</sup>-10<sup>3</sup> с<sup>-1</sup>. Динамические механические свойства на сжатие определяли на установке составных стержней Гопкинсона.

Проведена серия экспериментов по нагруженную сетчатого материала с объемно периодической структурой типа героид ударными волнами. В результате произведена оценка демпфирования ударной волны в зависимости от плотности и периода ячейки сетчатых образцов, а также толщины демпфирующего экрана. Установлено, что амплитуда ударной волны снижается с 33.3 ГПа до 23.9-27.6 ГПа при прохождении ударной волны через сетчатый материал. Среди исследованных образцов, сетчатый материал с периодом решетки 3 мм и толщиной стенки 0.2 мм обеспечивает наибольшее затухание ударной волны. Увеличение толщины экрана с 9 мм до 15 мм уменьшает давление ударной волны на 24%.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России, тема «Структура», № 122021000033-2.

Структурные исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» ИФМ УрО РАН.

## ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ НОВОГО AL-CU-MN СПЛАВА АЛТЭК

Петрова А. Н., Распоиенко Д. Ю., Астафьев В. В.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского  
отделения Российской академии наук  
petrova@imp.uran.ru*

В работе исследованы статические и динамические прочностные свойства литого крупнозернистого и деформированного мелкозернистого сплава АЛТЭК системы Al-Mn-Cu-Zr-Cr (Al-1.53Cu-1.66Mn-0.38Zr-0.15Cr-0.15Fe (масс. %)).

Литой сплав деформировали методом радиально-сдвиговой прокатки (РСП) с Ø40 мм до Ø24 мм при температуре 350 °С без промежуточных отжигов. Суммарный коэффициент вытяжки составил  $\mu=3.4$ . Методами просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа были изучены структурно-фазовые превращения в сплаве АЛТЭК в процессе РСП, определено влияние деформации на статические и динамические свойства сплава.

Эксперименты по нагружению ударными волнами проводились при комнатной температуре и при температуре 400 °С. Ударные волны сжатия генерировались в образцах толщиной 0.1 – 4 мм при соударении с алюминиевыми ударниками толщиной 0.05–0.95 мм, разогнанными с помощью пневматической пушки калибром 50 мм до скорости  $335 \pm 10$  м/с. В процессе нагружения проводилась регистрация профиля скорости свободной поверхности образцов -  $u_{fs}(t)$  с помощью лазерного доплеровского интерферометрического измерителя скорости VISAR с высоким пространственным ( $\sim 0.1$  мм<sup>2</sup>) и временным разрешением ( $\sim 1$  нс). Величину динамического предела упругости и откольной прочности определяли из анализа профилей скорости свободной поверхности образцов.

В результате проведенных экспериментов определено, что структура литого сплава неоднородна и представлена равноосными дисперсными зёрнами диаметром около 2 мкм в центральной части слитка и более крупными вытянутыми в радиальном направлении зёрнами размерами 4-6 мкм по периферии. По границам зёрен и дендритных ячеек образуются интерметаллидные фазы Al<sub>2</sub>Cu и Al<sub>6</sub>(Fe, Mn). Показано, что в результате РСП реализуется

значительная фрагментация зеренно-субзеренной структуры сплава, и формируется преимущественно полосовая структура, состоящая из субзерен со средним размером 1.5 мкм. Несмотря на значительное измельчение зеренной структуры, деформация сплава приводит к уменьшению динамического предела упругости при сохранении откольной прочности на уровне литого состояния. При этом статическая прочность деформированного сплава увеличивается на 30 % по сравнению с литым состоянием. Статический условный предел текучести сплава изменяется от 57 для литого сплава до 76 МПа после деформации и предел прочности от 166 до 251 МПа. Установлено, что рост температуры испытаний образцов до 400 °С способствует значительному снижению откольной прочности и динамического предела упругости сплава как в литом, так и в деформированном состоянии.

Таблица 1. Динамические свойства сплава АЛТЭК.

	Литой		После РСП 350 °С	
	$\sigma_T$ , ГПа	$\sigma_{sp}$ , ГПа	$\sigma_T$ , ГПа	$\sigma_{sp}$ , ГПа
Температура				
20 °С	0.15	1.09	0.14	1.01
400 °С	0.12	0.45	0.07	0.49
$\dot{\epsilon}$ , $10^5$ с <sup>-1</sup>	0.6-0.8			

Исследовано влияние ударно-волнового нагружения на структуру и твердость сохраненных образцов.

Эксперименты по нагружению ударными волнами выполнены в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема № АААА-А19-119071190040-5), структурные исследования и анализ волновых профилей выполнены в рамках проекта РНФ №22-23-00904.

Структурные исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» ИФМ УрО РАН.

## УСТОЙЧИВОСТЬ МАГНИТНЫХ СКИРМИОНОВ В СИНТЕТИЧЕСКИХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ

Поткина М.Н., Лобанов И.С., Уздин В.М.  
*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*  
*potkina.maria@yandex.ru.*

Магнитные скирмионы представляют собой топологически устойчивые структуры, которые в настоящее время рассматриваются как возможные биты информации в новом поколении магнитной памяти [1]. Поля размагничивания около скирмионов увеличивают их равновесный размер и приводят к взаимодействию между отдельными битами, что является негативным эффектом для приложений. Поля размагничивания могут быть значительно уменьшены, если топологические структуры находятся в антиферро-(АФ) или ферримагнитных многослойных системах. В таких системах наноразмерные магнитные скирмионы оказались стабильными даже при комнатной температуре [2]. Однако обнаружение двумерных скирмионов в АФ средах, а также в ферримагнетиках вблизи точки компенсации является более сложной задачей, чем их наблюдение в ФМ слое. Это стало одной из причин интереса к топологическим структурам в синтетических АФ (САФ) [3]. Такая система состоит из двух тонких пленок ФМ, разделенных слоем тяжелого металла. Толщина немагнитного слоя выбрана таким образом, чтобы обеспечить антиферромагнитную обменную связь между магнитными слоями. Тяжелый металл с сильной спин-орбитальной связью индуцирует взаимодействие Дзялошинского-Мория в магнитных пленках. В результате в двух магнитных слоях могут возникать киральные топологические магнитные структуры с противоположно направленными магнитными моментами. В работе [4] сообщалось об экспериментальном наблюдении скирмионов размером около 10 нм в САФ при комнатной температуре. Данная работа посвящена теоретическому исследованию влияния внешнего магнитного поля на устойчивость скирмионов в такой системе. Механизмы распада скирмионных структур и энергия активации таких процессов изучалась в рамках теории переходного состояния на основе анализа многомерной энергетической поверхности системы и построения путей с минимальным перепадом энергии между соответствующими состояниями [5]. Показано, что наиболее вероятный механизм коллапса скирмионных пар проходит через несимметричное

состояние со скирмионом в одном слое. Рассчитана энергия активации для такого процесса. Знание морфологии энергетической поверхности вблизи локальных минимумов и седловой точки позволило также рассчитать предэкспоненциальный фактор в законе Аррениуса для частоты распада скирмиона. В результате было показано, что при увеличении внешнего магнитного поля от 0 до 30 мТл энергия активации распада скирмиона возрастает от 900 мэВ до 1100 мэВ, что дает увеличение времени жизни скирмиона с нескольких минут до нескольких дней при комнатной температуре.

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

#### Литература

1. R. Wiesendanger, Nat. Rev. Mater., **1**, 16044, **2016**.
2. L. Caretta, et al., Nat. Nanotechnol., **13**, 1154, **2018**.
3. R. A. Duine, et al., Nat. Phys., **14**, 217, **2018**.
4. W. Legrand, et al., Nat. mater., **19**, 34, **2020**.
5. P. F. Bessarab, et al., Phys. Rev. B, **85**, 184409, **2012**.

### **ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ СПЛАВА Al-Fe, АРМИРОВАННЫХ МАЛЫМИ ДОБАВКАМИ ГРАФЕНА**

Распосиенко Д. Ю.<sup>1</sup>, Бродова И.Г.<sup>1</sup>, Маркина А.А.<sup>1</sup>,  
Марченков В.В.<sup>1</sup>, Елшина Л.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского  
отделения Российской академии наук, [dmitrijrasp@gmail.com](mailto:dmitrijrasp@gmail.com)

<sup>2</sup>Институт высокотемпературной электрохимии Уральского  
отделения Российской академии наук, [yolshina@ihte.uran.ru](mailto:yolshina@ihte.uran.ru)

Алюмоматричные композиты относятся к перспективному классу конструкционных материалов, поскольку, с одной стороны, обладают лучшими свойствами алюминиевых сплавов, с другой стороны, армирование различными наполнителями дополнительно повышает прочностные свойства и улучшает жаропрочность материала, тем

самым значительно расширяя области применения материалов на основе алюминия. Среди алюминиевых композитов отдельно можно выделить материалы с углеродосодержащими добавками, такими как углеродные нанотрубки, пленки графена, поскольку помимо повышения механических свойств: удельной прочности, твердости, износостойкости — также ожидается и возрастание электропроводности.

В настоящее время двумя основными способами изготовления алюмоматричных композитов являются метод твердосплавной обработки по технологии порошковой металлургии и жидкостной метод. Оба метода имеют свои существенные ограничения и недостатки. Перспективным методом получения алюмоматричных композитов, позволяющим устранить данные недостатки композиционных материалов, является разработанный ранее [1, 2] и используемый в данной работе метод синтеза графена *in situ* непосредственно в расплавленной алюминиевой матрице.

В рамках проведенного исследования изучены структура и свойства литых и деформированных сплава Al-2.5 Fe и композитов на его основе с 0.06 и 0.1 (вес. %) содержанием графена. В качестве основного метода деформации в нашей работе использовалось кручение под высоким давлением (КВД) на 5 и 10 оборотов.

Проведенный сравнительный анализ макроструктуры слитков сплава и композитов показал, что армирование алюминия графеном меняет характер кристаллизации. В отличие от зональной структуры, присущей литому алюминию, слиток композита имеет равномерную структуру, сформированную полиэдрическими зёрнами Al-твёрдого раствора. При этом графен не оказывает модифицирующего эффекта на зеренную структуру: диаметр равноосных зерен составляет 400-600 мкм. Равномерность структуры композита, по-видимому, обусловлена более высокой теплопроводностью расплава композита за счёт добавки графена. Тем не менее, добавки графена не приводят к изменению объемной доли, плотности распределения в пространстве, размеров и морфологии дендритов Al-твёрдого раствора, эвтектики ((Al) + Al<sub>13</sub>Fe<sub>4</sub>) и первичных кристаллов алюминиды железа Al<sub>13</sub>Fe<sub>4</sub>.

В процессе КВД формируется достаточно однородная субмикроструктурная структура, состоящая из зерен размерами от 90 до 450 нм. Большинство зерен характеризуются близкой к равноосной формой и разделены преимущественно весьма совершенными прямолинейными большеугловыми границами.

Помимо фрагментации зеренной структуры происходит дробление эвтектических и первичных кристаллов алюминидов  $Al_{13}Fe_4$  и их деформационно-индуцированное растворение с образованием пересыщенного раствора Fe в Al.

Образование субмикроструктур способствует повышению твердости деформированных композитов в 4 раза и удельного удельного электросопротивления в 1.9 раз. Изменение свойств связано с формированием высокодефектной микроструктуры и образованием пересыщенного твердого раствора Fe в Al. Также установлено, что микродобавка графена в 0.1 вес. % повышает удельную электропроводность композита, как в литом, так и деформированном состояниях.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России, тема «Структура», № 122021000033-2.

#### Литература

1. Елшина Л.А., Мурадымов Р.В. "Способ синтеза металл-графеновых нанокомпозитов" Патент РФ № 2623410. Оpubл. 25.01.2017.
2. Novel aluminum-graphene and aluminum-graphite metallic composite materials: synthesis and properties / Yolshina L.A., Muradymov R.V., Korsun I.V., Yakovlev G.A., Smirnov S.V. // J. Alloys and Compounds. 2016. V. 663. P. 449-459.

### **НОВАЯ ФИЗИКА НА СТЫКЕ СТАРЫХ МЕТОДОВ: ПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС В КВАНТОВОЙ СИСТЕМЕ**

Ремизов С.В.<sup>1,2,3</sup>, Елистратов А.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики  
им. Н.Л. Духова (ВНИИА), 127055 Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова  
РАН (ИРЭ РАН), 125009 Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Национальный исследовательский университет «Высшая школа  
экономики» (НИУ ВШЭ), 109028 Москва, Россия  
sremizov@gmail.com*

Теоретическое описание даже не слишком сложной физической системы может быть нетривиальной задачей, для успешного решения которой может потребоваться использование знаний из разных

областей физики, на первый взгляд, возможно, не имеющих непосредственной связи с решаемой задачей. Примером такой системы является параметрический усилитель бегущей волны (ПУБВ), который можно представить как цепочку связанных джозефсоновских переходов [1]. Интерес представляет генерация излучения, возникающего в такой системе под действием когерентной накачки при распаде моды накачки на сигнальную и холостую моды. Представив ПУБВ как метаматериал — нелинейную среду, этот процесс можно рассматривать как кинетику собственных мод ПУБВ, взаимодействующих между собой благодаря нелинейности. Для такого описания удобно воспользоваться теоретико-полевым подходом на основе техники Швингера-Келдыша. Важным моментом является необходимость принять во внимание наличие аномальных средних для заселённости мод, которые, как оказывается, играют ключевую роль. Поскольку такие аномальные средние отражают связь между соответствующими сигнальными и холостыми модами, удобно воспользоваться идеей представления Намбу, которая широко используется, в частности, в работах по сверхпроводимости.

Полученные нами квантовые кинетические уравнения для ПУБВ имеют одну примечательную особенность: в зависимости от формы спектра может меняться характер их решения — при замене сублинейного спектра суперлинейным степенной рост мощности сгенерированного излучения становится экспоненциальным. Так возникает задача создания ПУБВ со спектром, обеспечивающим режим экспоненциальной генерации излучения. Для решения этой задачи можно рассмотреть ПУБВ с чередующимися параметрами джозефсоновских переходов. Используя сверхпроводящие фазы параметра порядка, можно легко записать классический лагранжиан. Для построения диаграммной техники нам необходимо квантовое представление лагранжиана, для вывода которого необходимо сперва вывести классический гамильтониан, воспользовавшись знаниями из теоретической механики, и затем его проквантовать. В спектре, полученном при выводе гамильтониана, будут две моды — звуковая и оптическая. Для работы с ними удобно воспользоваться идеями теории твёрдого тела и рассмотреть ПУБВ как сверхрешетку. При этом возникает расширенная зона Бриллюэна со щелью посередине.

Для такого случая мы исследовали характер решения кинетических уравнений для заселённости мод. Мы показали, что при определённых параметрах системы и частотах накачки возникает режим экспоненциальной генерации. Возникновение такого режима

можно рассматривать как квантовый спектральный фазовый переход [2], управляющим параметром которого является частота накачки, а в качестве параметра порядка можно рассмотреть производную по частоте накачки от частоты, на которой мощность генерации максимальна. Суть данного фазового перехода заключается прежде всего в изменении вида спектра генерируемого излучения: при частотах накачки ниже критической максимум мощности достигается вблизи частоты накачки, а при частотах выше критической происходит снятие вырождения и частота максимума мощности излучения и частота накачки существенно различаются. Кроме того, во втором случае мощность излучения увеличивается на порядки по сравнению с первым случаем. Таким образом, в рассматриваемой задаче полезной оказывается теория неравновесных фазовых переходов, которая активно исследуется последнее время.

Также стоит упомянуть подходы из квантовой оптики, используя которые можно изучать квантовые свойства сгенерированного излучения, в частности сжатие.

Так, знания и методы разных областей физики, дополняя друг друга, позволяют получить описание и понимание физических процессов, происходящих в ПУБВ.

#### Литература

1. O. Yaakobi, et. al., Phys. Rev B **87**, 144301 **2013**
2. A.Roy, et. al., Nat Commun **12**, 835 **2021**

## РАСЧЕТ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕЖЧАСТИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Рыльцев Р. Е.<sup>1</sup>, Щелкачев Н. М.<sup>1,2</sup>, Кондратюк Н. Д.<sup>3</sup>,  
Анкудинов В. Е.<sup>2</sup>, Балякин И. А.<sup>1</sup>, Типеев А. О.<sup>1</sup>, Хазиева Е. О.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт металлургии УрО РАН*

<sup>2</sup>*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина*

<sup>3</sup>*Высшая школа экономики*

*rrylcev@mail.ru*

Металлургическими расплавами называют металлические и оксидные (шлаковые) системы, приведенные в жидкое состояние

путем некоторого высокотемпературного процесса (как правило – плавления в ходе нагрева). Изучение свойств металлургических расплавов играет большую роль в процессе изготовления твердых материалов и прогнозировании их свойств. В частности, знание транспортных характеристик расплавов, таких как вязкость или коэффициенты диффузии, являются необходимым для технологии металлургических процессов получения материалов.

Надежное экспериментальное определение транспортных характеристик металлургических расплавов является сложной задачей в силу высоких температур плавления. В связи с этим особую роль приобретают методы атомистического компьютерного моделирования, которые позволяют рассчитать любые характеристики атомного транспорта исходя из траекторий частиц. Ключевой проблемой этого подхода является соотношение точности и вычислительной эффективности. Действительно, первопринципные квантово-механические методы, которые обладают высокой точностью, позволяют изучать системы, состоящие всего лишь из сотен частиц на временах порядка десятков пикосекунд, что является недостаточным для расчета транспортных свойств. С другой стороны, методы классической молекулярной динамики позволяют моделировать системы из  $10^6$ - $10^9$  атомов на временах вплоть до микросекунд. Однако точность классического моделирования очень сильно ограничена необходимостью использования эмпирических межчастичных потенциалов, которые во многих случаях неспособны адекватно аппроксимировать сложный характер межатомного взаимодействия в сложных системах (например, многокомпонентных расплавов). Это особенно актуально при расчете транспортных свойств, которые очень чувствительны к точности описания межатомных сил.

В последние годы появился подход, позволяющий эффективно решать указанную проблему [1,2]. Он основан на использовании методов машинного обучения для генерирования потенциалов межатомного взаимодействия (MLIP – Machine Learning Interatomic Potentials). Основная идея такого подхода – аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью некоторой многочастичной функции общего вида используя референсные *ab initio* значения.

Расчет транспортных свойств жидкостей является одним из перспективных приложений моделирования на основе MLIP. В последние годы в этом направлении получены многообещающие результаты [3,4]. Вместе с тем, были выявлены новые проблемы, решение которых является настоящим вызовом для вычислительного

материаловедения. Одной из таких проблем является недостаточная точность стандартных *ab initio* методов, основанных на теории функционала плотности, для описания транспортных свойств некоторых расплавов. Другой проблемой является слишком большие времена релаксации для некоторых (например, оксидных) расплавов, которые делают расчеты транспортных свойств с помощью MLIP чрезвычайно трудоемкими.

В данной работе перечисленные выше вопросы и проблемы будут рассмотрены для нескольких систем, важных как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения: жидких Ga и Bi, металлических расплавов Al-Cu-(Ni), стеклообразующих сплавов Cu-Zr и SiO<sub>2</sub>, а также системы Fe-Cr-C.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 22-22-00506).

#### Литература

1. T. Wen, L. Zhang, H. Wang, E. Weinan, D. J. Srolovitz, *Materials Futures*, **1**, 022601, **2022**.
2. Y. Mishin, *Acta Mater.*, **214**, 116980, **2021**.
3. I. Balyakin, A. Yuryev, V. Filippov, B. Gelchinski, *Comput. Mater. Sci.* **215**, 111802, **2022**.
4. N. Kondratyuk, R. Ryltsev, V. Ankudinov, N. Chtchelkatchev, *J. Mol. Liq.* **380**, 121751, **2023**.

### **ОБ УЛУЧШЕНИИ МАТЕРИАЛЬНЫХ ЛОВУШЕК ДЛЯ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ СО СТЕНКАМИ, ПОКРЫТЫМИ ЖИДКИМ ГЕЛИЕМ**

Садовников А.В.<sup>1,2</sup>, Григорьев П.Д.<sup>3,4</sup>, Кочев В.Д.<sup>4</sup>, Дюгаев А.М.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Физический факультет, 119991, Россия

<sup>2</sup>Первый Московский государственный медицинский университет им.  
И.М. Сеченова, 119991, Россия

<sup>3</sup>Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, 142432,  
Черноголовка, Россия

<sup>4</sup>Национальный исследовательский технологический университет  
МИСиС, 119049, Москва, Россия

E-mail: [sadovnikov\\_a\\_v@staff.sechenov.ru](mailto:sadovnikov_a_v@staff.sechenov.ru)

Для снижения вероятности поглощения ультрахолодных нейтронов (УХН) материалом ловушки было предложено [1,2]

использовать в качестве покрытия жидкий гелий  ${}^4\text{He}$ , который совсем не поглощает нейтроны. Для удержания пленки жидкого гелия толщиной не менее 100 нм на стенках ловушки, было предложено создать на стенке искусственную шероховатость [2]. Наиболее оптимальным является треугольный (пирамидальный) профиль шероховатости, однако в вершинах треугольников толщины гелиевой пленки оказывается недостойно для экранирования УХН от материала ловушки.

Для увеличения толщины пленки вблизи вершин, мы предлагаем [3] расположить на расстоянии  $L$  от стенки источник электрического поля с напряжением  $V_0$ . Решая уравнение Лапласа методом конформных отображений, мы получили выражение для напряженности вблизи угла:

$$E(r) = \frac{E_0}{\lambda} \left( \frac{l_R}{r} \right)^{\frac{1}{\lambda}-1}; \lambda = 1 + \frac{2\beta}{\pi}, \quad (1)$$

где  $E_0 = \frac{V_0}{L}$  – напряженность однородного поля,  $l_R$  – длина основания треугольного выступа,  $h_R$  – высота выступа,  $\beta = \arctan(2h_R/l_R)$ .

Расчеты показали, что для удержания пленки толщиной  $d = 100$  нм на треугольных вершинах шероховатости стенки требуется поддерживать поле  $E \geq 230$  кВ/см вблизи острия. Для ловушек с треугольными шероховатостями на стенках, было предложено несколько вариантов конструкций электродов, и можно подобрать конструкцию, для которой достаточно напряжения  $V_0 \sim 1$  кВ между электродами.

Мы также провели обобщённый, по сравнению с [4], расчет скорости упругого рассеяния УХН на риплонах (квантах поверхностных волн). Для нейтрона с полной начальной энергией  $E_{init} \leq U_0$ , где  $U_0$  – оптический потенциал жидкого гелия, при температуре  $T = 0.01$  К среднее значение скорости рассеяния  $\omega_{\text{рип}} \approx 2.6 * 10^{-6} \text{ с}^{-1}$ . Это больше, чем получено в [4] для нижнего квантового уровня нейтрона, но позволит увеличить точность определения времени жизни нейтрона  $\tau_n$  до  $\frac{\tau_n}{\tau_{\text{рип}}} \sim 10^{-3}$ .

Поскольку такой точности, теоретически, можно достичь при очень низких температурах, мы также изучили влияние электрического поля на закон дисперсии риплонов. За счёт малости значения диэлектрической проницаемости жидкого гелия ( $\epsilon_{\text{He}} = 1.054$ ) однородное поле практически не вносит изменений в закон дисперсии, в то время как неоднородное поле позволяет увеличить

частоту риплонов, что в свою очередь может снизить скорость неупругого рассеяния УХН на термически активированных риплонах и увеличить точность определения времени жизни нейтрона  $\tau_n$ . Обсуждаются другие способы уменьшить скорость неупругого рассеяния УХН на риплонах.

Исследование проводилось при поддержке гранта РФФ № 23-22-00312.

#### Литература

1. P. D. Grigoriev and A. M. Dyugaev, [Phys. Rev. C \*\*104\*\*, 055501 2021](#).
2. P. D. Grigoriev, A. M. Dyugaev, T. I. Mogilyuk, and A. D. Grigoriev, [JETP Letters \*\*114\*\*, 493 2021](#).
3. P.D. Grigoriev, A.V. Sadovnikov, V.D. Kochev, A.M. Dyugaev, [arXiv:2303.04429](#).
4. P. D. Grigoriev, O. Zimmer, A. D. Grigoriev, and T. Ziman, [Phys. Rev. C \*\*94\*\*, 025504 2016](#)

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЁНОК $\text{LaNiO}_3$ В РАМКАХ МЕТОДА DFT+U

Сажаев Г.А.<sup>1</sup>, Леонов И.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт естественных наук и математики, УрФУ, г.*

*Екатеринбург*

<sup>2</sup>*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева, ИФМ УрО РАН, г.*

*Екатеринбург*

*georgysazhaev@yandex.ru*

В настоящее время большой практический и фундаментальный интерес представляет микроскопическое описание механизмов формирования аномальных электронных, магнитных и решеточных свойств поверхностей и тонких пленок серии сильно коррелированных соединений никелатов с перовскитной структурой  $R\text{NiO}_3$  ( $R^{3+}$  – ион редкой земли) [1-3]. Микроскопическое моделирование свойств различных типов поверхностей данных материалов (с различным типом обрыва связей на поверхности, полярных и неполярных, и т.д.) также позволяет изучать эффекты квантового ограничения и свойства новых квази-двумерных электронных и магнитных фаз, что недоступно в объемных кристаллах.

В данной работе, в рамках обобщенного метода DFT+U [4,5] был проведен расчет электронной структуры немагнитного состояния тонких пленок (001)  $\text{LaNiO}_3$  на диэлектрической подложке (001)  $\text{LaAlO}_3$ , с поверхностью обрезанной по атомарному слою  $\text{NiO}_2$ . DFT+U вычисления проводились для асимметричного слэба (001)  $\text{LaNiO}_3/\text{LaAlO}_3$ , с атомарной толщиной  $\text{LaNiO}_3$  пленки  $\sim 5.7 \text{ \AA}$  (1.5 ячейки  $\text{LaNiO}_3$ , содержащие два атомных слоя  $\text{NiO}_4$ , уложенных в  $ab$  плоскости, перпендикулярно оси  $z$ ). В DFT+U для данных соединений была проведена релаксация кристаллической решетки, исследовалась стабильность искажения кристаллической решетки по «дышащей моде» в  $\text{LaNiO}_3$  слое, были вычислены равновесные атомные позиции для различных типов магнитного упорядочения магнитных моментов ионов Ni: для FM, AFM G-типа и AFM с вектором  $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ . В рамках DFT+U расчетов был проведен сравнительный анализ электронной структуры и магнитных свойств данных соединений для различных типов упорядочения, анализ полных энергий различных магнитных решений, анализ решений с искажением решетки по «дышащей моде», проведен анализ эффекта квантового ограничения и переноса заряда, орбитальной поляризации и зарядового расслоения ионов Ni.

В рамках структурной релаксации  $\text{LaNiO}_3/\text{LaAlO}_3$  в DFT+U для AFM G-типа и  $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$  было получено металлическое решение (при этом плотность состояний на уровне Ферми мала) с волной зарядовой плотности в интерфейсном (подповерхностном)  $\text{NiO}_2$  слое с характерным вектором распространения (110). При этом DFT+U решение дает характерное коллективное искажение кристаллической решетки по «дышащей моде» в интерфейсном  $\text{NiO}_2$  слое. Для FM  $\text{LaNiO}_3$  структурная оптимизация в рамках DFT+U дает отсутствие зарядового расслоения ионов Ni в плоскости  $ab$ , при этом зарядовое расслоение между ионами никеля в интерфейсном и терминируемом слое составляет 0.17 электрона. Величина разделения заряда  $\sim 0.1$  электрона для AFM  $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$  и AFM G-типа. DFT+U решение для FM  $\text{LaNiO}_3/\text{LaAlO}_3$  обладает наименьшей полной энергией, с разницей энергии относительно AFM G-типа  $\sim 30$  мэВ/Ni и  $\sim 52$  мэВ/Ni по сравнению с AFM  $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-22-00926.

#### Литература

1. Catalano S., Gibert M., Fowlie J., Íñiguez J., Triscone J.-M., Kreisel J. Rare-earth nickelates  $R\text{NiO}_3$ : thin films and heterostructures // Rep. Prog. Phys. – 2018. – Т. 81. – С. 046501.

2. Golalikhani M., Lei Q., Chandrasena R. U., Kasaei L., Park H. *et al.* Nature of the metal-insulator transition in few-unit-cell-thick LaNiO<sub>3</sub> films // Nat. Commun. – 2018. – Т. 9 . – С. 2206.
3. Fowlie J., Gibert M., Tieri G., Gloter A., Iniguez J., Filippetti A., Catalano S., Gariglio S., Schober A., Guennou M., Kreisel J., Stephan O., Triscone J.M. Conductivity and Local Structure of LaNiO<sub>3</sub> Thin Films // Adv. Mater. – 2017. – Т. 29. – С. 1605197.
4. Liechtenstein A.I., Anisimov V.I., Zaanen J. Density-functional theory and strong interactions: Orbital ordering in Mott-Hubbard insulators // Phys. Rev. B. – 1995. – Т. 52. – С. 5467(R).
5. Anisimov V. I., Solovyev I. V., Korotin M. A., Czyzyk M. T., Sawatzky G. A. Density-functional theory and NiO photoemission spectra // Phys. Rev. B. – 1993. – Т. 48. – С. 16929

## СПОНТАННЫЕ ТОКИ И ГЕНЕРАЦИЯ ВИХРЕЙ В ПЛАНАРНЫХ ГИБРИДНЫХ СТРУКТУРАХ СВЕРХПРОВОДНИК/ФЕРРОМАГНЕТИК С НЕОДНОРОДНЫМ ОБМЕННЫМ ПОЛЕМ И ЭФФЕКТОМ РАШБЫ

Самохвалов А.В.<sup>1</sup>, Буздин А.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики микроструктур РАН, г. Нижний Новгород*

*e-mail: [samokh@ipmras.ru](mailto:samokh@ipmras.ru)*

<sup>2</sup>*University Bordeaux, France.*

Существенное влияние на магнитные и транспортные свойства гибридных систем сверхпроводник(С)/ферромагнетик(Ф) оказывают спин-орбитальные (СО) эффекты, когда импульс электрона  $\mathbf{p}$  оказывается связанным со спином  $\sigma$ . Исследование подобных систем представляет интерес как с точки зрения фундаментальной науки (поиск майорановских фермионов и топологической сверхпроводимости), так и из-за потенциальной применимости их в интересах сверхпроводниковой спинтроники. Для широкого класса сверхпроводящих структур с планарной геометрией причиной СО эффектов служит взаимодействие Рашбы  $v_R [\mathbf{n} \times \mathbf{p}] \cdot \boldsymbol{\sigma}$ , возникающее на СФ интерфейсе таких структур из-за нарушения инверсной симметрии [1]. Здесь  $\mathbf{n}$  - это единичный вектор вдоль направления, в котором нарушена симметрия относительно пространственной

инверсии,  $\sigma$  - вектор матриц Паули, а  $v_R$  - характерная скорость Рашбы, определяющая константу СО-связи  $\alpha_R = \hbar v_R$ . В сочетании с обменным полем  $\mathbf{h}$  (или эффектом Зеемана) СО взаимодействие формирует сверхпроводящее состояние со спиральной (геликоидальной) фазовой модуляцией [2], для которого характерно наличие куперовских пар с ненулевым суммарным импульсом  $\mathbf{q}$  в направлении  $[\sigma \times \mathbf{n}]$ . В рамках феноменологических моделей совместное влияние СО взаимодействия и обменного поля описывается в функционале Гинзбурга-Ландау слагаемым вида  $[\mathbf{n} \times \mathbf{h}](\nabla \psi) \psi^*$  (инвариант Лифшица), которое пропорционально градиенту сверхпроводящего параметра порядка  $\psi$  [3]. В однородных планарных системах формирование геликоидального состояния, однако, не приводит к генерации в системе спонтанного сверхтока.

В докладе рассмотрены примеры тонкопленочных СФ структур с эффектом близости, в которых ферромагнетик индуцирует обменное поле только в ограниченной области сверхпроводника [4]. Формирование в пленке сверхпроводника неоднородного в плоскости геликоидального состояния сопровождается возникновением спонтанного сверхтока, амплитуда и распределение которого зависят как от силы СО взаимодействия, так и от структуры и величины обменного поля. Изучены условия формирования в таких структурах вихревых состояний, индуцированных спонтанным током, и влияние магнитокиральных эффектов на джозефсоновский транспорт в планарных гибридных системах со слабыми связями.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 20-12-00053.

#### Литература

1. Е. И. Рашба, ФТТ, 2, 1224, 1960; L. P. Gor'kov, E. I. Rashba. Phys. Rev. Lett., **87**, 037004, 2001; V. M. Edelstein. Phys. Rev. B, **67**, 020505, 2003.
2. V. Barzykin, L. P. Gor'kov, Phys. Rev. Lett., **89**, 227002, 2002; O. Dimitrova, M.V. Feigel'man, Phys. Rev. B, **76**, 014522, 2007.
3. V.P. Mineev, M. Sigrist, in Lecture notes in Physics 847, 129, 2012; V. M. Edelstein, J. Phys. Condens. Matter **8**, 339, 1996.
4. J. W. A. Robinson, A. V. Samokhvalov, and A. I. Buzdin, Phys. Rev. B, **99**, 180501(R), 2019; L. A. B. Olde Olthof, X. Montiel, J. W. A. Robinson, and A. I. Buzdin, Phys. Rev.,B, **100**, 220505(R) (2019); A. B. Самохвалов, ЖЭТФ, **162**, 941, 2022.

# ДИНАМИКА ФУНКЦИИ ВИГНЕРА С ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ ПРЕДСТАВЛЕННАЯ В ВИДЕ СВЁРТКИ

Сеидов С. С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИТУ «МИСИС», Москва 119049, Россия

*alikseidov@yandex.ru*

Формализм квантовой механики в фазовом пространстве предполагает описание квантовых систем с помощью вещественных функций, а не операторов [1-3]. Данные функции определены на фазовом пространстве системы и связаны с квантовомеханическими операторами преобразованием Вейля, называются символами Вейля [4]. Так, для оператора  $\hat{A}$  его символ Вейля есть (в одномерном случае)

$$A(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ipy} \left\langle x - \frac{y}{2} \left| \hat{A} \right| x + \frac{y}{2} \right\rangle dy.$$

Состояние квантовой системы в этом подходе определяется символом Вейля матрицы плотности  $\hat{\rho}$  — функцией Вигнера. Если квантовое состояние чистое, то есть  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ , функцию Вигнера можно записать как

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ipy} \psi^* \left( x - \frac{y}{2} \right) \psi \left( x + \frac{y}{2} \right) dy.$$

Динамика функции Вигнера определяется уравнением Мoyalя

$$\dot{W} = i \{ \{ H, W \} \} = i (H \star W - W \star H),$$

где  $H$  — символ Вейля гамильтониана, символом  $\star$  обозначено произведение Мoyalя:

$$A(x, p) \star B(x, p) = A(x, p) e^{\frac{i}{2} (\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x)} B(x, p).$$

Для свободной частицы с массой  $m$

$$\dot{W}(x, p, t) = -\frac{p}{m} \frac{d}{dx} W(x, p, t).$$

В работе рассмотрена задача об отражении одномерной частицы от непроницаемой стенки, а затем её решение обобщено на случай многомерной потенциальной ямы произвольной формы. Если потенциальная энергия бесконечна при  $x \leq 0$  и равна нулю при  $x > 0$ , то функция Вигнера частицы должна удовлетворять граничному условию  $W(x \leq 0, p, t) = 0$ . Волновую функцию частицы можно

представить как  $\psi(x, t) = \varphi(x, t)\theta(x)$ , где  $\varphi(x, t)$  произвольная функция такая, что  $\varphi(0, t) = 0$  и  $\theta(x)$  — функция Хевисайда. Подставляя в определение функции Вигнера получим её в виде

$$W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ipy} \varphi^* \left( x - \frac{y}{2}, t \right) \varphi \left( x + \frac{y}{2}, t \right) \theta \left( x - \frac{y}{2} \right) \theta \left( x + \frac{y}{2} \right) dy.$$

Интеграл выше есть преобразование Фурье произведения, его можно представить как свёртку преобразований Фурье. В частности,

$$W(x, p) = F \left[ \varphi^* \left( x - \frac{y}{2} \right) \varphi \left( x + \frac{y}{2} \right) \right] * F \left[ \theta \left( x - \frac{y}{2} \right) \theta \left( x + \frac{y}{2} \right) \right].$$

Первый член это функция Вигнера свободной частицы, а второй — независимая от времени функция. То есть, функцию Вигнера отражающейся от стенки частицы удалось представить, как свёртку функции Вигнера свободной частицы с некоторой функцией, определяющейся граничными условиями. Обобщение на многомерный случай и потенциальную яму произвольной формы производится выбором надлежащей функции, определяющей граничные условия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" (грант НИТУ «МИСиС» № К2-2022-025).

## Литература

1. E. Wigner, On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium, *Physical Review* 40, 749 (1932).
2. A. Polkovnikov, Phase space representation of quantum dynamics, *Annals of Physics* 325, 1790 (2010).
3. C. Zachos, Deformation quantization: Quantum mechanics lives and works in phase-space, *International Journal of Modern Physics A* 17, 297 (2002).
4. H. Weyl, *Quantenmechanik und Gruppentheorie*, *Zeitschrift für Physik* 46, 1 (1927).

# ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ И МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ САМОСБОРКИ КОЛЛОИДНОЙ МЯГКОЙ МАТЕРИИ

Симкин И. В.<sup>1</sup>, Широкова А.А.<sup>1,2</sup>, Драгун М.А.<sup>1</sup>, Крючков Н.П.<sup>1</sup>,  
Либет П.А.<sup>1</sup>, Юрченко С.О.<sup>1</sup>, Яковлев Е.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия

<sup>2</sup> ИФВД РАН, Калужское ш., д.14, Москва, Россия

*vanyasimkin@gmail.com*

Коллоидная мягкая материя — это физические системы, которые представляют собой частицы размером от нанометров до микрометров, называемых коллоидами, диспергированных в среде, называемом сольвентом. Помещая коллоидные системы во внешнее управляющее поле, например, в электрическое, магнитное, световое или гравитационное, можно управлять межчастичным взаимодействием [1]. Таким образом, управляемая коллоидная мягкая материя служит модельной системой для понимания, как равновесного фазового поведения: газ, жидкость, твердое тело [2], так и неравновесных фазовых переходов: гелеобразование, стеклование [3], а также роль эффективных взаимодействий в системах многих тел [4], которые могут быть применены к атомарным, молекулярным и биологическим системам [5].

Общей чертой всех этих систем является то, что требуется разработка подходов и методов пост-обработки для оценки их физических характеристик. Так, современные методы обработки позволяют изучать параметры пузырей в микрофлюидных чипах [6], в биореакторах [7], а также структурные параметры и фазовые превращения в коллоидных системах микрочастиц во внешних управляющих полях [8].

Актуальной областью исследования в области коллоидной мягкой материи является изучение кинетики самосборки и фазовых превращений в мягкой материи при помещении их во внешние трехмерные управляющие поля [9]. Исследования таких систем откроют путь для разработки метода 3D принтинга, для создания новых функциональных и биосовместимых материалов.

В данной работе показано применение разработанных методов, основанных на нейросетевых подходах, для исследования самосборки в системе коллоидных частиц микронных размеров, помещенных в трехмерные поля.

При увеличении магнитуды взаимодействия в такой системе частицы выстраиваются в вертикальные структуры вдоль оси  $Z$  (вектор индукции магнитного направлен вдоль оси  $Z$ ). Разработанный алгоритм позволил отследить трек каждой частицы, вышедшей из фокуса камеры, формируя струнку, и вычислить количество частиц в образованной вертикальной структуре. Было установлено, что распределение по длинам в данной системе носит экспоненциальный характер.

Изучение коллоидных систем, помещенных во внешние поля с трехмерным географом управляющего поля, помимо трудности, обеспечения однородности поля, связано со сложностью регистрации частиц при видеофиксации системы в плоскости  $XY$ . В отличие от регистрации частиц только в вертикальных полях, в трехмерных полях необходимо отслеживать положение, как в плоскости  $XY$ , так и вдоль оси  $Z$ . Для этого была обучена нейронная сеть и разработаны пакеты обработки, позволяющая детектировать частиц в объеме  $XYZ$  и проводить трекинг.

Таким образом, в работе был разработан и отлажен программный пакет для распознавания коллоидных микрочастиц в трехмерных полях. Разработанный пакет был применен к видео микрочастиц во внешнем вертикальном магнитном поле и была впервые получена фазовая диаграмма, а также был получен коэффициент диффузии частиц полистирола размером 10 мкм в водном растворе глицерина без управляемых взаимодействий.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ № 22-72-10128 на базе МГТУ им. Н.Э. Баумана.

## Литература

1. Yakovlev E.V. et al. Sci. rep., **7**, 1–10, **2017**
2. Janai E. et al. Sci Rep **6**, 28578, **2016**
3. Misra C. et al. J. Colloid Interface Sci., **630**, 223-231, **2023**
4. Yakovlev E.V. et al. J. Colloid Interface Sci., **608**, 564-574, **2022**
5. Mewis J., Wagner N. J., Cambridge university press, **2012**
6. Stoecklein D. et al. Sci. rep. 7, 1, 1-11, **2017**.
7. Nizovtseva I. et al. Algorithms., **16**, 3, 125, **2023**
8. Li B. et al. Nature Reviews Materials, **1**, 15011, **2016**
9. Komarov K.A. et al. Soft Matter, **16**, 35, 8155-8168, **2020**

# ВЛИЯНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ НА РЕШЕТОЧНЫЕ, СПЕКТРАЛЬНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СВЕРХПРОВОДНИКА НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА $\text{YFe}_2\text{Ge}_2$

Скорняков С. Л.<sup>1,2</sup>, Анисимов В. И.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского  
отделения РАН,*

<sup>2</sup>*Уральский федеральный университет имени первого Президента  
России Б.Н. Ельцина  
skornyakov@imp.uran.ru*

Сверхпроводящие системы на основе железа находятся в центре внимания широкого круга исследователей [1]. Многие свойства соединений данного класса являются крайне необычными даже в нормальном состоянии и не находят объяснения в рамках стандартных теоретических и вычислительных подходов, основанных на теории функционала электронной плотности. В этой связи учет кулоновских корреляционных эффектов представляется необходимым и важным для объяснения микроскопических механизмов формирования ряда электронных, магнитных и решеточных аномалий в данных веществах [2].

Достаточно долго все известные сверхпроводники на основе железа были представлены пниктидами или халькогенидами, объединенными наличием в кристаллической структуре Fe-As (Fe-Se, Fe-Te) слоев. Система  $\text{YFe}_2\text{Ge}_2$  является первым и уникальным примером сверхпроводника на основе железа, не имеющего в своем составе пниктидного элемента или халькогена [3].

В данной работе, используя подход DFT+DMFT, объединяющий теории функционала электронной плотности (DFT) и динамического среднего поля (DMFT), было выполнено исследование влияния кулоновских корреляционных эффектов на структурные, спектральные и магнитные свойства нормального состояния  $\text{YFe}_2\text{Ge}_2$ . На первом этапе в рамках модели всестороннего расширения и сжатия была произведена оптимизация объема элементарной ячейки  $\text{YFe}_2\text{Ge}_2$  (тетрагональная структура, пространственная группа

$I4/mmm$ ) и координаты атома германия  $z_{\text{Ge}}$ . Установлено, что учет корреляционных эффектов в подходе DFT+DMFT позволяет существенно улучшить согласие рассчитанных структурных параметров  $\text{YFe}_2\text{Ge}_2$  с экспериментом по сравнению с результатом, получаемым методом DFT. Далее, на основании расчетов спектральных свойств был сделан вывод о том, что  $\text{YFe}_2\text{Ge}_2$  является умеренно-коррелированной системой. Это проявляется в существенном перенормировании зонной структуры в окрестности энергии Ферми и отсутствии локализации спектрального веса в хаббардовских зонах. Было показано, что сдвиги и перенормировки зон, обусловленные орбитальной зависимостью корреляционных эффектов, значительно улучшают согласие рассчитанной поверхности Ферми с данными фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением и результатами экспериментов по наблюдению эффекта де Гааза — ван Альфена [4]. В заключительной части работы был произведен расчет и анализ зависимости спиновой восприимчивости от волнового вектора, а также локальной спиновой корреляционной функции, который указал на формирование короткоживущих локальных моментов в  $3d$  состояниях с симметрией  $t_{2g}$ , а также на присутствие конкурирующих ферромагнитных и антиферромагнитных спиновых корреляций, что согласуется с экспериментальными данными [5].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект № 19-12-00012).

#### Литература

1. Q. Si, R. Yu, E. Abrahams, Nat. Rev. Mater., **1**, 16017, **2016**
2. R. M. Fernandes, A. V. Chubukov, Rep. Prog. Phys., **80**, 014503, **2017**
3. J. Chen, K. Semeniuk, Z. Feng, P. Reiss, P. Brown, Y. Zou; P. W. Logg, G. I. Lampronti, F. M. Grosche, Phys. Rev. Lett., **116**, 127001, **2016**
4. J. Baglo, J. Chen, K. Murphy, R. Leenen, A. McCollam; M. L. Sutherland, F. M. Grosche, Phys. Rev. Lett., **129**, 046402, **2022**
5. J. Srpčič, P. Jeglič, I. Felner, B. Lv, C. W. Chu, D. Arčon, Rev. B, **96**, 174430, **2017**

# АНТИФЕРРОМАГНЕТИКИ $R\text{V}_{12}$ С ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ СТРУКТУРНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ И ЭЛЕКТРОННЫМ ФАЗОВЫМ РАССЛОЕНИЕМ

Случанко Н.Е.

*Институт Общей Физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия  
nes@lt.gpi.ru*

В докладе представлено современное состояние исследований редкоземельных додекаборидов  $R\text{V}_{12}$  (R- Но, Er, Tm, Yb и Lu) и твердых растворов замещения на их основе с сильными электронными корреляциями и антиферромагнитным основным состоянием, в которых одновременно активными оказываются зарядовые, спиновые, орбитальные и решеточные степени свободы. Показано, что аномальные свойства соединений  $R\text{V}_{12}$  обусловлены развитием кооперативной динамической ян-теллеровской (ЯТ) неустойчивости ковалентной подрешетки бора, причем ЯТ-эффект обуславливает *статические* структурные искажения борного ковалентного каркаса и понижение симметрии ГЦК кристаллической структуры [1]. Скоррелированные ЯТ *динамические* искажения кубооктаэдров  $\text{V}_{12}$  (ferrodistortive effect) являются причиной возникновения коллективных мод в оптических спектрах  $R\text{V}_{12}$  и квазилокальных колебаний (rattling modes) тяжелых РЗ ионов, что вызывает модуляцию электронной плотности зоны проводимости и приводит к появлению полос динамического заряда (страйпов) в этих сильно коррелированных электронных системах [2].

Рассматривается механизм, ответственный за появление динамических зарядовых страйпов, и роль эффектов электронного фазового расслоения в возникновении аномальных свойств в немагнитном реперном соединении  $\text{LuV}_{12}$  и антиферромагнетиках (АФ)  $R\text{V}_{12}$  (R- Но, Er и Tm) и  $\text{Tm}_{1-x}\text{Yb}_x\text{V}_{12}$ , в которых наблюдается большое количество различных магнитных фаз и фазовых переходов между ними. Приводятся примеры анизотропных АФ фазовых диаграмм в форме «мальтийского креста» и «бабочки» (см. рис.1), обсуждаются природа подавления РККИ обменного взаимодействия, спин-поляронные эффекты и формирование волн спиновой плотности (ВСП), конкуренция между которыми обуславливает изменение характера магнитной анизотропии вдоль ряда  $R\text{V}_{12}$  и при замещении Tm на Yb в  $\text{Tm}_{1-x}\text{Yb}_x\text{V}_{12}$  [3-6]. Выполнен анализ магнетосопротивления в антиферромагнетиках  $R\text{V}_{12}$ , позволивший

установить режимы рассеяния носителей заряда в магнитоупорядоченной фазе. Представлены 3D ( $H$ - $\theta$ - $\varphi$ ) магнитные фазовые диаграммы соединений  $\text{HoB}_{12}$ ,  $\text{ErB}_{12}$  и  $\text{TmB}_{12}$ .

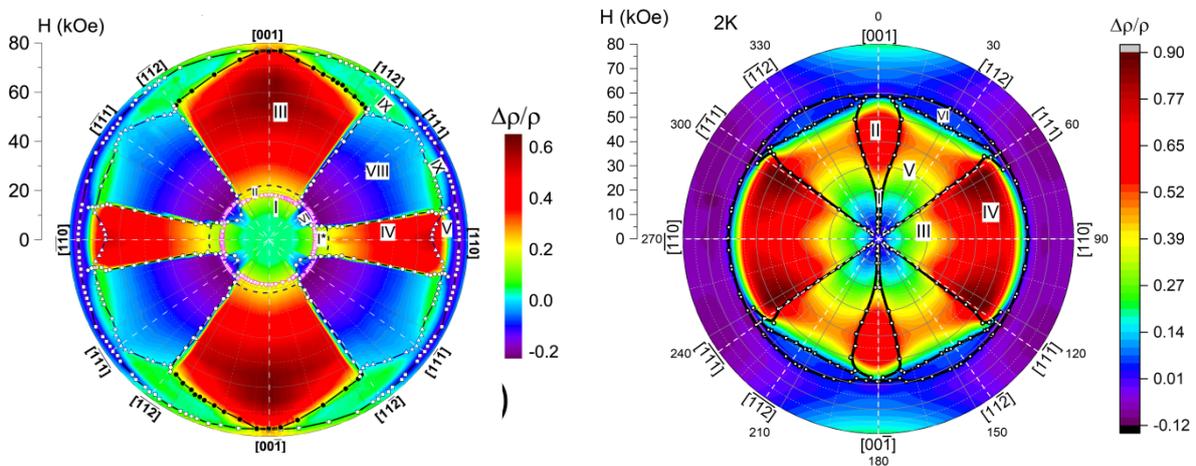


Рис.1. Анизотропия магнетосопротивления и магнитные фазовые  $H$ - $\varphi$  диаграммы в форме «мальтийского креста» для  $\text{HoB}_{12}$  (левая панель) и «бабочки» для  $\text{ErB}_{12}$  (правая панель) при  $T=2$  К в плоскости  $H//\langle 110 \rangle$ . Цветом показана амплитуда эффекта, римскими цифрами обозначены различные магнитные фазы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-22-00243.

### Литература

1. N. V. Bolotina et al., in *Rare-Earth Borides*, edited by D. S. Inosov (Jenny Stanford Publishing, Singapore, 2021), Chap. 3, pp. 293–330
2. N. E. Sluchanko, *ibid*, Chap. 4, pp. 331–442
3. K. Krasikov et al., *Phys. Rev. B* **102**, 214435, **2020**
4. A. Azarevich et al., *J. Phys. Condens. Matter* **34**, 065602, **2022**
5. A. Azarevich et al., *J. Magn. Magn. Mat.* **574**, 170671, **2023**
6. К.М. Красиков и др., *Письма в ЖЭТФ* **117**, 530, **2023**

## МАГНЕТОТРАНСПОРТ В ТРЕХМЕРНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРАХ НА ОСНОВЕ ХАЛЬКОГЕНИДОВ ВИСМУТА И СУРЬМЫ

Степина Н.П.<sup>1</sup>, Баженов А.О.<sup>1</sup>, Шумилин А.С.<sup>2</sup>, Кунцевич А.Ю.<sup>2</sup>,  
Климова Е.С.<sup>3</sup>, Кох К.А.<sup>3</sup>, Терещенко О.Е.<sup>1</sup>, Жданов Е.С.<sup>1</sup>,  
Ищенко Д.В.<sup>1</sup>, Рыбин М. Г.<sup>5</sup>

<sup>1</sup>ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>ФТИ им Иоффе, 194021, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup>ИГМ СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

<sup>4</sup>ФИАН им Лебедева, 119991 Москва, Россия

<sup>5</sup>ИОФ им Прохорова, 119991 Москва, Россия

*nstepina@mail.ru*

Проведено исследование магнетосопротивления и эффекта Холла в пленках двух- (BS) и четырех-компонентного (BSTS) топологического изолятора на основе халькогенидов висмута и сурьмы. Пленки выращены с помощью физического осаждения из газовой фазы и молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках слюды, кремния Si(111) и CVD - графене, перенесенном на подложку Si/SiO<sub>2</sub>. Показано, что несмотря на то, что в проводимости двухкомпонентных пленок Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, выращенных на графене, доминирует вклад объема, магнетосопротивление (MC) определяется как объемными, так и поверхностными состояниями. Вклад топологических поверхностных состояний структуры Si/SiO<sub>2</sub>/графен/ТИ проявляется в эффекте слабой антилокализации (САЛ). При уменьшении толщины пленки от 50 до 20 нм происходит переход от эффекта САЛ, типичной для транспорта через поверхностные состояния трехмерного ТИ, к эффекту слабой локализации.

На пленках BSTS, выращенных на кремнии, обнаружено положительное MC, которое не насыщается вплоть до полей 12 Т и величина которого в малых полях превышает теоретические значения для САЛ. Высоко-полевая часть MC слабо чувствительна к направлению магнитного поля и может быть описана с учетом электрон-электронного взаимодействия, которое изменяется в магнитном поле за счет эффекта Зеемана из-за достаточно больших значений g-фактора для таких пленок.

Подробный анализ эффекта Холла показал, что коэффициент Холла немонотонен и сильно меняется в слабых полях, причем величина его нелинейности зависит от концентрации носителей заряда и достигает 10-20% в образцах с низкой электронной

плотностью. Эффект практически не зависит от температуры вплоть до 20 К. Для совместного описания МС и эффекта Холла предложена модель, основанная на открытии щели в дираковском спектре поверхностных состояний за счет эффекта Зеемана и соответствующем перераспределении транспортных потоков. Этот механизм совместно с эффектом САЛ и электрон-электронного взаимодействия позволяет качественно объяснить наблюдаемые экспериментальные эффекты.

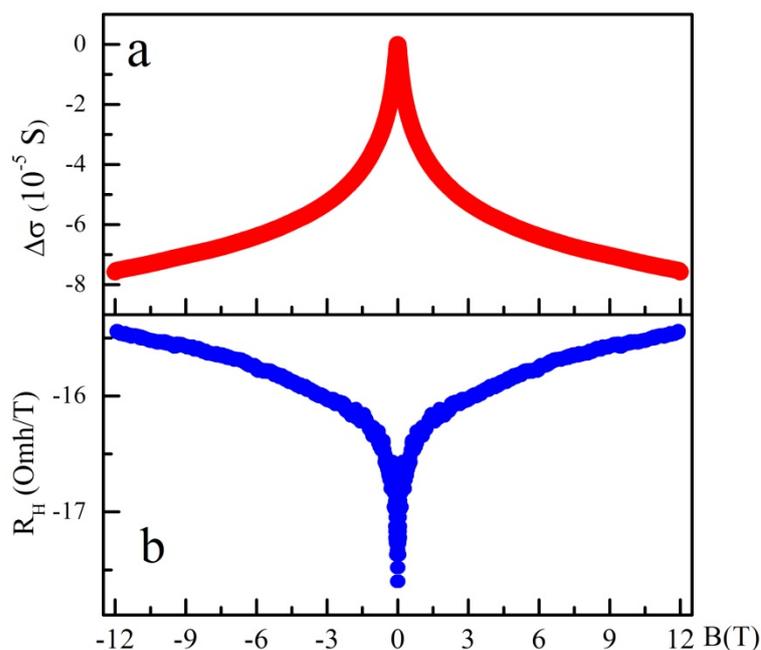


Рис.1. Магнетосопротивление (a) и коэффициент Холла (b) для BSTS пленки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант №075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

### ЧТО БЫВАЕТ ПОСЛЕ ВИШНЕВКИ?

Стрельцов С. В.

*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского  
отделения РАН  
streltsov.s@gmail.com*

В докладе будут обсуждаться результаты нескольких работ, которые возникли после плодотворных научных дискуссий в пос.

Вишневка г. Сочи во время проведения конференций “Проблемы физики твердого тела и высоких давлений” [1,2].

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 23-42-00069)

#### Литература

1. S.V. Streltsov, R.E. Ryltsev, N.M. Chtchelkatchev, *Journal of Alloys and Compounds* **912**, 165150, **2022**
2. S. Lim, S. Pan, K. Wang, A.V. Ushakov, E.V. Sukhanova, Z.I. Popov, D.G. Kvashnin, S.V. Streltsov, S.-W. Cheong, *Nano Letters* **22**, 1812, **2022**

## СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ В НИЗКОСИММЕТРИЧНЫХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ

Тарасенко С. А.

*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург*

*tarasenko@coherent.ioffe.ru*

Спин-орбитальное взаимодействие в полупроводниковых структурах без центра инверсии приводит к спиновому расщеплению электронных и дырочных подзон даже в нулевом магнитном поле. Хорошо известными вкладками в такое расщепление являются вклады Рашбы и Дрессельхауза, обусловленные соответственно структурной и объемной асимметрией.

В докладе обсуждается физика линейного по волновому вектору  $k$  спин-орбитального расщепления электронных и дырочных состояний в двумерных системах на основе полупроводниковых квантовых ям. Показано, что в квантовых ямах, выращенных вдоль низкосимметричных кристаллографических направлений, имеется дополнительный, помимо вкладов Рашбы и Дрессельхауза, вклад в гамильтониан спин-орбитального расщепления [1]. Более того, в широком диапазоне параметров этот вклад является основным и определяет линейное по  $k$  расщепление подзоны тяжелых дырок в квантовых ямах на основе полупроводников III-V.

Обсуждается также тонкая структура двумерных дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe вблизи перехода «топологический изолятор — тривиальный изолятор». Показано, что

объемная, интерфейсная или структурная асимметрия снимает вырождение дираковских состояний. В квантовых ямах критической толщины дважды вырожденный конус Дирака расщепляется на невырожденные конусы Вейля, а положение точек Вейля зависит от кристаллографической ориентации квантовой ямы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 22-12-00211).

#### Литература

1. G.V. Budkin and S.A. Tarasenko, Spin splitting in low-symmetry quantum wells beyond Rashba and Dresselhaus terms, *Phys. Rev. B*, **105**, L161301, **2022**
2. М.В. Дурнев, Г.В. Будкин, С.А. Тарасенко, *ЖЭТФ* (специальный выпуск, посвященный Рашба), **162**, 570, **2022**

### **ИНДУЦИРОВАННОЕ УПРУГИМИ НАПРЯЖЕНИЯМИ ИЗМЕНЕНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ ФОТОЭМИТИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ МУЛЬТИЩЕЛОЧНОГО ФОТОКАТОДА**

Кустов Д.А.<sup>1</sup>, Русецкий В.С.<sup>1</sup>, Голяшов В.А.<sup>1</sup>, Терещенко О.Е.<sup>1</sup>  
*ИФП СО РАН, Новосибирск, 630090, пр. Ак. Лаврентьева, 13*  
*эл. почта: teresh@isp.nsc.ru*

Несмотря на относительно долгую историю развития источников спин-поляризованных электронов (около 50 лет) востребованность в поиске новых и совершенствовании известных источников остается актуальной. Создание высокоэффективных и стабильных источников спин-поляризованных электронов необходимо для ускорителей и коллайдеров нового поколения (например, электрон-позитронный коллайдер Супер-чарм-тау фабрика (Саров, Новосибирск)), а также методов электронной микроскопии и спектроскопии.

Экспериментально и теоретически нами было показано, что фотокатод на основе  $\text{Na}_2\text{KSb}$  демонстрирует очень схожие спин-зависимые оптические и фотоэмиссионные свойства с теми, которые наблюдаются для GaAs [1]. Хорошо известно, что в материалах III-V степень круговой поляризации (DOCP) люминесценции и спин-поляризованной электронной эмиссии является функцией деформации кристалла. В работе сравнивается температурная зависимость DOCP данных фотолюминесценции (ФЛ) с измеренной

спиновой поляризацией электронов при использовании фотокатодов  $\text{Na}_2\text{KSb}$  в качестве фотоэммиттеров с отрицательным сродством к электрону. Деформация в пленке  $\text{Na}_2\text{KSb}$  создавалась разницей в коэффициентах теплового расширения  $\text{Na}_2\text{KSb}$  и стеклянной подложки. Начиная с 23% ДОСР ФЛ и 40-50% поляризации электронов при комнатной температуре, индуцированное температурой сжимающее напряжение сначала приводило к падению поляризации до нуля при температуре около 90 К, а затем до отрицательных значений поляризации ФЛ (-33%). В работе обсуждаются механизмы релаксации спина в фотокатодe  $\text{Na}_2\text{KSb}$ .

### Литература

1. V. S. Rusetsky, et al., Phys. Rev. Lett. **129**, 166802, 2022

## **ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $\text{CuCo}_2\text{S}_4$ : РАСЧЕТЫ В РАМКАХ ПОДХОДА DFT+DMFT**

Трифонов И.О.<sup>1,2</sup>, Скорняков С.Л.<sup>1,2</sup>, Анисимов В.И.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского  
отделения РАН*

<sup>2</sup> *Уральский федеральный университет  
trifonov@imp.uran.ru*

Сверхпроводимость в соединениях кобальта наблюдается крайне редко. Долгое время единственным представителем сверхпроводников на основе кобальта считалась система  $\text{Na}_{0.35}\text{CoO}_2 \cdot 1.3\text{H}_2\text{O}$ . Реализация сверхпроводящего состояния в стехиометрическом составе структурно близкого соединения  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$  оставалась под вопросом, хотя большой объем экспериментальных данных указывал на сверхпроводимость нестехиометрических поликристаллических образцов. Недавние измерения транспортных и магнитных свойств нового поколения кристаллов  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$  зарегистрировали сверхпроводящий переход при  $T_c = 4,2$  К [1]. Ввиду отсутствия консенсуса относительно механизма формирования куперовских пар в соединениях с номинальным составом  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$  и наличия данных о важности кулоновских корреляций [2], интерес

представляет исследование влияния корреляционных эффектов на электронную структуру и магнитные свойства  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$ .

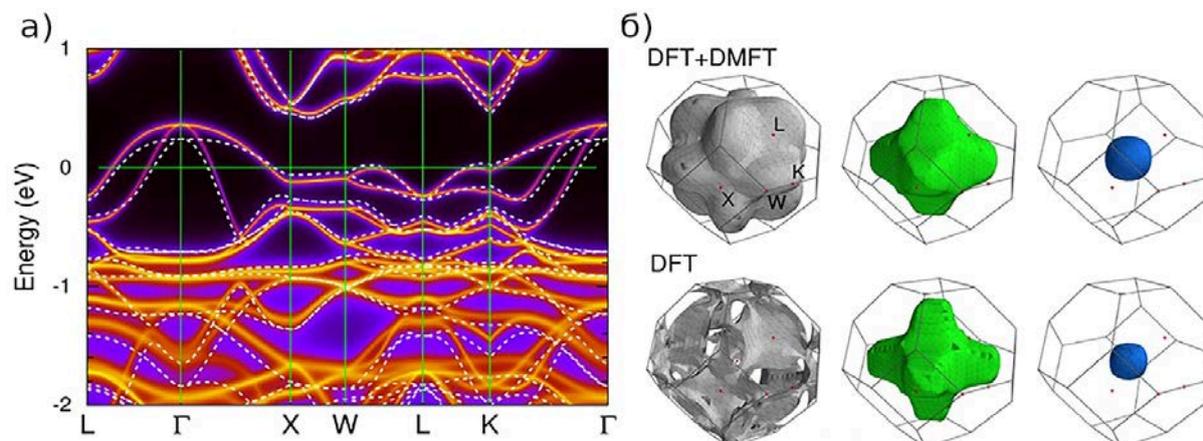


Рис.1. а) Сравнение спектральной функции соединения  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$ , рассчитанной методом DFT+DMFT для высокосимметричных направлений в зоне Бриллюэна (контуры), с зонной структурой, полученной методом DFT (пунктирные линии). б) Листы поверхности Ферми  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$ , полученные методами DFT+DMFT (верхний ряд) и DFT (нижний ряд).

В данной работе были произведены расчеты спектральных и магнитных свойств  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$  методом DFT+DMFT, объединяющим теорию функционала электронной плотности (DFT) и теорию динамического среднего поля коррелированных электронов (DMFT). Было показано, что спектральные функции  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$ , рассчитываемые как в рамках DFT, так и в DFT+DMFT, имеют качественно близкую форму, соответствуют металлу и характеризуются широким пиком на уровне Ферми, преимущественно обусловленным вкладами  $3d$  орбиталей Co  $t_{2g}$  симметрии. Установлено, что учет кулоновских корреляций не приводит к переносу спектрального веса из окрестности энергии Ферми в хаббардовские зоны и может быть описан масштабным преобразованием спектральной функции, полученной в DFT (Рис.1а). Перенормировки квазичастичных масс  $m^*/m$  составили 1.18 и 1.22 для  $t_{2g}$  и  $e_g$  состояний, соответственно, что более чем в 2 раза меньше значений, рассчитываемых в рамках DFT+DMFT для сверхпроводящих соединений на основе железа (FeSC) [3]. Данные результаты позволили сделать вывод о слабых корреляционных эффектах в  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$ . Вместе с тем было установлено, что корреляционные эффекты, оказывающие незначительное влияние на спектральные функции, существенно преобразуют поверхность Ферми. А именно, сдвиг зон на направлении W-L в окрестности энергии Ферми приводит к

качественному изменению формы внешнего листа поверхности Ферми (Рис. 1б), что может указывать на важность кулоновских корреляций для объяснения транспортных свойств  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$ .

Дополнительно, были рассчитаны флуктуирующий и локальный магнитный момент для 3d состояний Co, которые оказались равны 1.00 и 0.18  $\mu_B$ , соответственно. Данные величины существенно меньше соответствующих характерных значений, получаемых в подходе DFT+DMFT для FeSC. Полученный результат был интерпретирован как следствие слабых спиновых флуктуаций в  $\text{CuCo}_2\text{S}_4$ , что позволяет поставить под сомнение применимость спин-флуктуационного механизма сверхпроводимости.

Мы благодарим Российский научный фонд за поддержку в рамках проекта 19-12-00012.

### Литература

1. Yu-Ying Jin, Phys. Rev. Materials **5**, 074804 **2021**
2. G. Baskaran, Phys. Rev. Lett. **91**, 097003, **2003**
3. Z. P. Yin, K. Haule, G. Kotliar, Nat. Mater. **10**, 932, **2011**

## ДИНАМИКА РЕШЁТКИ И ТЕПЛОЁМКОСТЬ МНОГОСЛОЙНОГО ГРАФАНА

Усманов Р. И.<sup>1,2</sup>, Колесников А. И.<sup>3</sup>, Кузовников М. А.<sup>4</sup>,  
Кулаков В. И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Научно исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва*

<sup>2</sup>*Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка*

<sup>3</sup>*Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, USA*

<sup>4</sup>*Centre for Science at Extreme Conditions and School of Physics and Astronomy, University of Edinburgh, Edinburgh, United Kingdom,  
ri.usmanov@hse.ru*

Многослойный графан (гидрид графита) – это новый углеводород состава  $\text{CH}$ , синтезированный в ИФТТ РАН [1] и представляющий собой теоретически предсказанную ранее [2] фазу «графан II» 3D-графана, состоящую из гофрированных слоёв 2D-графана в «chair» модификации, упакованных в последовательности –АВАВ–. Следует, однако, отметить, что выводы работы [1] о кристаллической

структуре графана основывались лишь на сравнении структуры углеродной подрешетки образцов, определенной методом рентгеновской дифракции, со структурами наиболее устойчивых фаз 3D-графана, рассчитанными в работе [2]. Согласно этим расчетам, фаза «графан II» отличается от всех других фаз гидрида графита наличием щели между зонами акустических и оптических колебаний, что позволяет однозначно идентифицировать её путем изучения динамики решетки методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН).

Мы провели НРН исследование порошковых образцов гидрида и дейтерида графита при  $T = 6$  К на нейтронном спектрометре SEQUOIA в Окриджской национальной лаборатории (США). Колебательные спектры гидрида и дейтерида в модификации «графан II» были также рассчитаны методом функционала электронной плотности в приближении LDA, что позволило корректно отнормировать полученные в НРН экспериментах спектры  $G(E)$  обобщенной плотности фононных состояний и преобразовать их в спектры  $g(E)$  плотности фононов. В колебательных спектрах действительно имелась надежно выделявшаяся щель шириной порядка 10 мэВ, отделявшая акустическую зону от оптических зон.

Из спектров  $g(E)$ , полученных как из НРН измерений, так и из *ab initio* расчетов для фаз «графан II», были рассчитаны температурные зависимости решеточной теплоемкости  $C_V(T)$ , хорошо согласовавшиеся между собой как для гидрида, так и для дейтерида графита. Чтобы оценить точность расчета этих зависимостей, мы провели калориметрические измерения теплоемкости  $C_P(T)$  гидрида и дейтерида графита при атмосферном давлении в диапазоне температур 130–670 К с помощью дифференциального сканирующего калориметра Perkin-Elmer DSC-7. В пределах погрешности измерения 5% калориметра DSC-7 температурные зависимости измеренных теплоемкостей  $C_P(T)$  не отличались от рассчитанных зависимостей  $C_V(T)$ .

Таким образом, можно считать доказанным, что гидрид и дейтерид графита – это 3D-фазы «графан II», и что точность полученных спектров  $g(E)$  достаточно высока для расчета температурных зависимостей теплоемкости этих фаз. Отметим, что до настоящего времени спектры  $g(E)$  с точностью, достаточной для таких расчетов, были определены лишь для двух гидридов –  $\text{AlH}_3$  и  $\text{MgH}_2$  [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта № 23-22-00361. Работа также частично

финансировалась в рамках проекта научно-учебных групп НИУ ВШЭ (№23-00-01) и программы Horizon 2020 Европейского Союза (грант № 948895, MetElOne). Нейтронные исследования проводились на нейтронном спектрометре SEQUOIA, установленном на импульсном источнике нейтронов Пользовательского центра Отдела научных исследований Министерства энергетики США в Окриджской национальной лаборатории.

## Литература

1. V. E. Antonov et al., Carbon **100**, 465, **2016**
2. X.-D Wen et al., PNAS **108**, 6833, **2011**
3. V. E. Antonov et al., J. Alloys Compnd. **905**, 164208, **2022**

## **КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ВЫСШЕГО БОРИДА ВОЛЬФРАМА $W_{5-x}$ : СИНТЕЗ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ**

Филоненко В.П., Бугаков В.И., Зибров И.П., Анохин А.С.  
*Институт физики высоких давлений РАН, Москва, г. Троицк*  
*filv@hppi.troitsk.ru*

Керамические или металлокерамические композиты на основе боридов переходных металлов находят применение в различных областях благодаря уникальной комбинации свойств. Расчет стабильности структур и прочности фаз в системе вольфрам-бор показал перспективность синтеза боридов вольфрама с максимальным содержанием бора. Высокие механические характеристики таких боридов связывают с большой плотностью валентных электронов и ковалентными связями [1].

Синтез образцов на основе высшего борид вольфрама проводили в камерах поршень-цилиндр (1.5 ГПа, 1000-1200°C), тороид (3-7 ГПа, 1100-1600°C) и дуговой плавкой в вакууме. Исходными компонентами были порошки вольфрама и бора с размерами  $\approx 1$  мкм. Для исследования применяли рентгенофазовый анализ, микроскопию и термогравиметрию, определялись микротвердость и износостойкость при точении песчаника.

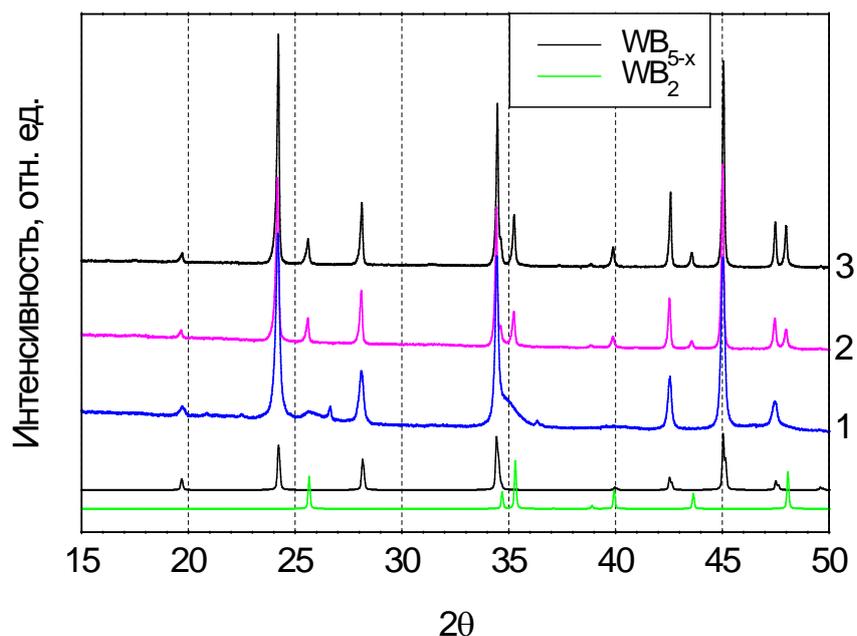


Рис 1. Фазовый анализ образцов: 1 – синтез при 4 ГПа, 1100 °С; 2 – синтез при 1.5 ГПа, 1200 °С; 3 – вакуумно-дуговая плавка  $\approx 2200^\circ\text{C}$

Из рисунка 1 видно, что в полученных образцах кроме высшего борид вольфрама, имеющего стехиометрию  $\text{WB}_{4.2}$  [2], присутствует диборид вольфрама. Определены условия синтеза, обеспечивающие максимальное содержание в образцах высшего борид вольфрама. Средняя твердость композитов  $\text{WB}_{4.2}\text{-WB}_2$ , полученных спеканием порошков, составила 29.3 ГПа, а после дуговой плавки - 33.9 ГПа, что в 1.5 раза выше значений для твердых сплавов на основе карбида вольфрама.

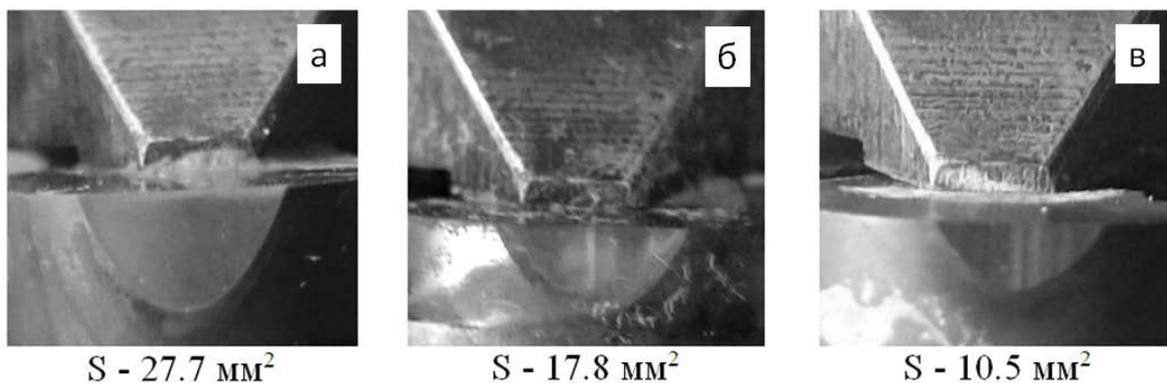


Рис. 2. Пятна износа после точения песчаника: а – твердый сплав ВК6, б – борид вольфрама  $\text{WB}_{5-x}$ , в – алмазоподобный нитрид бора

Новые композиты показали также хорошие результаты по устойчивости к окислению на воздухе и при точении песчаника. По износостойкости они значительно превышают твердый сплав, но уровень алмазоподобного нитрида бора не достигается (Рис. 2). Такие

эксплуатационные характеристики могут обеспечить эффективную работу режущих элементов в экстремальных условиях.

При синтезе металлокерамических композитов на основе боридов вольфрама опробованы различные варианты связок.

Работа выполнена в рамках программы Министерства науки и высшего образования РФ FFUW-2021-0003.

#### Литература

1. A.G. Kvashnin, H.A. Zakaryan, C. Zhao, Y. Duan, Y.A. Kvashnina, C. Xie, H. Dong, A. R. Oganov. *J. Phys. Chem. Lett.* 9, 3470-77, 2018.
2. A.G. Kvashnin, D.V. Rybkovskiy, V. P. Filonenko, V. I. Bugakov, I.P. Zibrov, V.V. Brazhkin, A.R. Oganov, A.A. Osiptsov, and A.Ya. Zakirov. *Adv. Science.* 7, 16, 2000775, 2020.

### **УЛЬТРАЗВУКОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ ПРОПИЛЕНГЛИКОЛЯ ПРИ ДАВЛЕНИЯХ ДО 1.4ГПа**

Фомин Ю. Д., Данилов И.В., Громницкая Е.Л.

*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН  
Fomin314@mail.ru*

Пропиленгликоль является важной жидкостью, применяемой в ряде технологических процессов, в первую очередь, как антифриз. Поэтому изучение его свойств имеет важное значение как для фундаментальной науки, так и для прикладных применений. В тоже время свойства пропиленгликоля при высоком давлении практически не изучены.

В настоящей работе проводится измерение упругих модулей и плотности пропиленгликоля ультразвуковыми методами до рекордно высокого давления в 1ГПа при комнатной температуре и температуре жидкого азота. Результаты измерений дополняются компьютерное моделирование методом молекулярной динамики с двумя различными моделями: COMPASS [1] и Charm [2].

Было показано, что уравнение состояния из ультразвуковых измерений при комнатной температуре хорошо совпадает с полученным из моделирования с моделью COMPASS. Основываясь

на этом, данная модель была выбрана для изучения микроскопических свойств пропиленгликоля. Были произведены расчёты радиальных функций распределения центров масс молекул и парциальные радиальные функции распределения атомов кислорода и водорода. На основе последних было оценено число водородных связей в системе. Было получено, что оно составляет примерно 0.6 связей на молекулу и практически не зависит от давления.

Работа опубликована в статье [3].

Экспериментальная часть работы поддержана грантом РФФ №22-22-00530. Компьютерное моделирование было проведено при поддержке гранта РФФ №19-12-00111.

### Литература

1. Sun H. // COMPASS: An ab-initio force-field optimized for condensed-phase application – overview with details on alkane and benzene compounds// J. Phys. Chem. B 1998., V. 102, 38. P. 7338-7364
2. Vanommeslaeghe K., Hatcher E., Acharya C., Kundu S., Zhong S., Shim J., Darian E., Guvench O., Lopes P., Vorobyov I., Mackerell Jr. A.D.// CHARMM General Force Field (CGenFF): A force field for drug-like molecules compatible with the CHARMM all-atom additive biological force fields// J. Comput. Chem. 2010. V. 31. P. 671-690
3. Fomin Yu. D., Danilov I. V., Gromnitskaya E. L.// Ultrasonic study and molecular dynamics simulation of propylene glycol at pressures up to 1.4 GPa// Physica Scripta. 2023. DOI 10.1088/1402-4896/acc1b5

## ОРБИТАЛЬНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ И ПОЛЯРОННЫЙ ХОППИНГ В ШПИНЕЛЯХ $\text{Fe}\cdot\text{Fe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$

Фоминых Н. А.<sup>1,2</sup>, Стегайлов В.В.<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский Физико-Технический Институт (НИУ)

<sup>3</sup>НИУ Высшая Школа Экономики

*fominykh.na@phystech.edu*

Описание свойств оксидов железа в частности электронной структуры магнетита  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , хромита  $\text{FeCr}_2\text{O}_4$  и их переходных

состояний может быть необходимо для понимания механизмов коррозии стали [1].

Основываясь на предыдущем успешном описании сложных механизмов орбитального и магнитного упорядочения магнетита в рамках теории функционала плотности с учетом сильных корреляций в приближении DFT+U [2,3], с помощью выбора оптимального  $U_{Cr}$  была получена расширенная модель для систем содержащих хром [4].

В данной работе в рамках этой модели будут представлены расчеты электронной структуры при различных концентрациях хрома. Показано изменение характера орбитального упорядочения при высоких концентрациях хрома. Также, так как для данных шпинелей хоппинг малых поляронов является одним из основных механизмов переноса заряда, будет рассмотрено влияние изменения электронной структуры на возможность образования поляронов электронного и дырочного типа и энергии активации соответствующих возможных процессов хоппинга.

#### Литература

1. N. A. Fominykh, V. P. Nikolskiy, V. V. Stegailov, *Comput. Mater. Sci.*, **220**, 112061, **2023**
2. М. И. Шутикова, В. В. Стегайлов, *ЖЭТФ*, **160 (2)**, 249, **2021**
3. М. I. Shutikova, V. V. Stegailov, *J. Phys. Condens. Matter.*, **34 (47)**, 475701, **2022**
4. Н. А. Фоминых, В. В. Стегайлов, *Письма в ЖЭТФ*, **117 (11)**, 857, **2023**

### **АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР В СИСТЕМЕ Al-Cu С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОТЕНЦИАЛОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

Хазиева Е.О.<sup>1</sup>, Щелкачев Н.М.<sup>2</sup>, Рыльцев Р.Е.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург*

<sup>2</sup> *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН,  
Москва*

*cat.hazieva@yandex.ru*

Проблема соотношения точности и эффективности очень остро проявляется в атомистическом моделировании наноразмерных объектов. Действительно, при использовании чисто

первопринципных методов моделирования, возможно описывать частицы, состоящие всего лишь из нескольких сот атомов, что соответствует размерам частиц менее 1 нм. Изучая объекты с такими размерами, часто именуемые нанокластерами, невозможно воспроизвести весь спектр уникальных свойств наноструктур, для этого требуется рассмотрение масштабов как минимум до десятков нанометров. Использование классических потенциалов без труда позволяет моделировать объекты размерами десятки и сотни нанометров, однако в этом случае сложно добиться высокой точности описания свойств. Действительно, к имеющимся трудностям параметризации традиционных потенциалов для описания объемных свойств, добавляется необходимость правильного описания наноструктурированных поверхностей раздела. Очевидным решением указанных трудностей является применение потенциалов машинного обучения. Такое приложение является одним из наиболее перспективным для данного класса потенциалов.

Для сплавов Al-Cu интерес к моделированию наноструктур обусловлен важностью рассмотрения механизмов роста наноразмерных дисперсионных включений и их взаимодействием с дислокациями. Моделирование таких процессов является задачей дальнейших исследований. На данном этапе были поставлены ряд модельных задач об определении температуры плавления наночастиц алюминия и меди, а также наночастиц меди и алюминия в матрице друг друга в зависимости от их размера. Данная задача решалась ранее как экспериментально, так и методами атомистического моделирования с использованием EAM потенциалов, что дает сравнительные данные для верификации полученных результатов.

Были рассмотрены изолированные наночастицы алюминия и меди с размерами в интервале 2-10 нм, что соответствует числам частиц в интервале 246-27509, которые моделировались в изотермических условиях при различных температурах. Изменение структурного состояние частицы детектировалось путем анализа параметра Линдемана, потенциальной энергии и локальной структуры атомов. Для частицы каждого размера были построены зависимости равновесных значений параметра Линдемана и потенциальной энергии от температуры.

Результаты моделирования температуры плавления алюминия и меди количественно согласуются с литературными данными [1-3], потенциал количественно правильно описывает энергетику таких структур, а также воспроизводит известный эффект уменьшения

температуры плавления наночастиц по сравнению с объемным материалом. Получен интересный структурный эффект возникновения икосаэдрических структур в жидкости.

Наночастицы в матрице моделировались размерами в интервале 2-6 нм, соответствующие числам частиц 16195- 298521, также в изотермических условиях при различных температурах. Для наночастиц алюминия и меди в матрице друг друга, аналогично, наблюдается рост температуры с выходом на постоянное значение. Потенциал качественно воспроизводит структуру жидкости, находящуюся в наноконфайнменте.

Полученные результаты открывают перспективы для дальнейшего моделирования наноструктур с помощью потенциалов машинного обучения.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 22-22-00506).

Литература:

1. P. Puri, V. Yang, J. Phys. Chem.C, 111, 1176–11783, **2007**.
2. S. L. Lai, J. R. A. Carlsson, L. H. Allen, Appl. Phys. Lett, **72**, 1098–1100, **1998**.
3. S. Alavi, D.L. Thompson, J. Phys. Chem. A., **110**, 1518–1523, **2006**.

## **ПЕРИОДИЧНОСТЬ АНОМАЛЬНОГО ПОВЕДЕНИЯ ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЫ С ПОТЕНЦИАЛОМ ГЕРЦА**

Гайдук Е. А.<sup>1</sup>, Фомин Ю. Д.<sup>1</sup>, Циок Е. Н.<sup>1</sup>, Бобков С. А.<sup>2</sup>, Рыжов В. Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений РАН им. Верещагина*

<sup>2</sup>*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Федеральный центр коллективного пользования научным оборудованием «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса»*

*elena.tsiok@gmail.com*

В работе [1] методом молекулярной динамики нами была исследована двумерная система дисков Герца с показателем  $\alpha = 5/2$  в потенциале. Было установлено, что фазовая диаграмма такой системы состоит из множества кристаллических фаз, таких как треугольная, квадратная, ромбическая, растянутая треугольная, фаза

додекагонального квазикристалла; многочисленных максимумов и минимумов на кривых плавления, и областей с аномалией плотности вблизи области возвратного плавления кристаллических фаз. Увеличение жесткости потенциала Герца ( $\alpha = 7/2$ ) привело к кардинальному изменению фазовой диаграммы. В этой системе единственной устойчивой кристаллической фазой был треугольный кристалл с чередующимися максимумами и минимумами на кривой плавления, механизм такого поведения представлен в работе [2]. Исследование сценариев двумерного плавления показало, что на всей протяженности кривой плавления, начиная с первого максимума, система плавится по одному из трех известных сценариев [3, 4]. В системе реализуется классический сценарий согласно теории Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга, то есть путем двух последовательных переходов типа Березинского-Костерлица-Таулеса с промежуточной гексатической фазой. Для исследования аномалии плотности (отрицательный коэффициент теплового расширения) в двумерной системе дисков Герца с показателем  $\alpha = 7/2$  в работе [5] был применен комплексный подход, включающий исследование термодинамического механизма этого явления и вычисление фононных спектров для продольных и поперечных мод колебаний. На основании комплексного подхода к исследованию аномального поведения двумерной системы дисков Герца с показателем  $\alpha = 7/2$  было обнаружено аномальное поведение плотности (давления) в кристалле вдоль разных траекторий: на изохорах и на изотермах [6]. В области аномалии плотности в кристалле было обнаружено аномальное поведение параметров трансляционного и ориентационного порядка, а именно, их значения уменьшаются при изотермическом сжатии, указывая на существование структурной аномалии, причем аномалия параметра трансляционного порядка выражена значительно сильнее чем аномалия ориентационного порядка [6]. Полученные данные хорошо согласуются также и с результатами вычисления фононных спектров для продольных и поперечных мод колебаний [5], хотя в этом случае сильнее выражена связь аномалии плотности с поперечными колебаниями кристаллической решетки. Такая корреляция свойств свидетельствует о наличии сильно размытого изоструктурного превращения в аномальной области фазовой диаграммы системы дисков Герца.

Кроме того, в системе была обнаружена аномалия диффузии, которая означает увеличение коэффициента самодиффузии при

изотермическом сжатии. Важным результатом настоящей работы является демонстрация периодичности наличия водоподобных аномалий плотности и диффузии в областях возвратного плавления.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 19-12-00092 <https://rscf.ru/project/19-12-00092/>).

## Литература

1. Yu. D. Fomin et al., *Molecular Physics*, **116**, 3258, **2018**
2. E. Tsiok et al., *Soft Matter*, **16**, 3962, **2020**
3. В. Н. Рыжов и др., *УФН*, **187**, 921, **2017**
4. В. Н. Рыжов и др., *ЖЭТФ*, **164**, 143, **2023**
5. Eu. A. Gaiduk et al., *Physical Review E*, **106**, 024602, **2022**
6. Eu. A. Gaiduk et al., *Physics of Wave Phenomena*, **31**, 135, **2023**

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В ДОПИРОВАННЫХ СЛОИСТЫХ НИКЕЛАТАХ $RNiO_2$ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Шиленко Д.А.<sup>1,2</sup>, Леонов И.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева, ИФМ УрО РАН,  
г. Екатеринбург*

<sup>2</sup>*Физико-Технологический институт, УрФУ, г. Екатеринбург  
shilenko.dmitrii@mail.ru*

Открытие сверхпроводимости в пленках легированных слоистых никелатов  $RNiO_2$  (рис.1) (где  $R=Pr, Sr, La$  и тд.) в 2019 г. [1] вызвало большой интерес к исследованию решеточных, электронных и магнитных свойств данного класса соединений [2-6]. При этом, было показано, что величина критической температуры перехода  $T_c$  демонстрирует существенный рост при изменении структурных параметров системы (при эпитаксиальной деформации решетки и/или под давлением) [2]. В данной работе, в рамках метода DFT+DMFT было проведено исследование электронной структуры, анализ топологии поверхности Ферми и магнитных корреляционных эффектов соединения  $La_{1-x}Sr_xNiO_2$  с  $Sr$   $x=0-0.4$  для различных структурных параметров системы ( $a$  и  $a/c$ ). Полученные результаты

свидетельствуют о значительной орбитально-селективной перенормировке  $3d$  состояний Ni, с отношением эффективных масс  $m^*/m = 3$  и  $1.3$  для Ni  $d_{x^2-y^2}$  и  $d_{3z^2-r^2}$  орбиталей (для  $x=0$ ), соответственно [3]. При дырочном легировании в  $RNiO_2$  происходит фазовый переход Лифшица, связанный с изменением топологии Ферми поверхности и, как следствие, реконструкцией вектора магнитных корреляций системы от трехмерного неелевского G-типа (111) к квази-2D типу (110). Была показана фрустрация магнитных взаимодействий в  $RNiO_2$ , которая приводит к подавлению магнитного порядка, что свидетельствует о важности спиновых флуктуаций в объяснении природы сверхпроводимости в  $RNiO_2$ . Анализ DFT+DMFT результатов демонстрирует аномальное поведение вектора магнитных корреляций  $\chi(\mathbf{q})$  вблизи высоко-симметричных A и M точек зоны Бриллюэна. При допировании в  $RNiO_2$  и с изменением решеточных параметров ( $a$  и  $c/a$ ) наблюдается аномальная зависимость  $\chi(\mathbf{q})$ , предполагающая формирование спиновых и зарядовых страйп упорядочений в  $RNiO_2$  [5]. Под давлением происходит общее падение интенсивности магнитной восприимчивости, сопровождающееся сложной конкуренцией различных спин-волновых состояний. Данное поведение находится в согласии с экспериментально наблюдаемым ростом критической температуры перехода  $T_c$  с изменением структурных параметров системы.

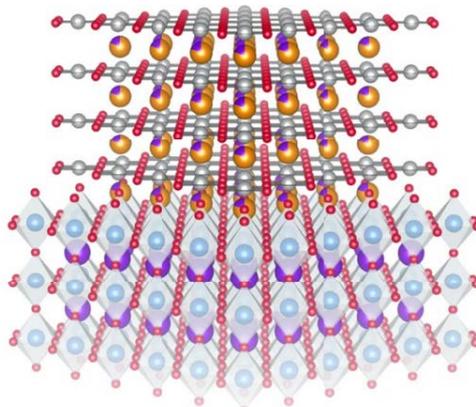


Рис.1: Пленка слоистого никелата  $RNiO_2$ , выращенная на подложке (001)  $SrTiO_3$ .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-22-00926.

#### Литература

1. D. Li et al., Superconductivity in an infinite-layer nickelate, Nature (London) **572**, 627 (2019).

2. N.N. Wang et al., Pressure-induced monotonic enhancement of  $T_c$  to over 30 K in superconducting  $\text{Pr}_{0.82}\text{Sr}_{0.18}\text{NiO}_2$  thin films, *Nature Commun.* **13**, 4367 (2022).
3. I. Leonov, S. L. Skornyakov, and S. Y. Savrasov, Lifshitz transition and frustration of magnetic moments in infinite-layer  $\text{NdNiO}_2$  upon hole doping, *Phys. Rev. B* **101**, 241108(R) (2020).
4. M. Kitatani et al., Optimizing superconductivity: from cuprates via nickelates to palladates, arXiv:2207.14038 (2022).
5. K.G. Slobodchikov and I.V. Leonov, Spin density wave, charge density wave, and bond disproportionation wave instabilities in hole-doped infinite-layer  $\text{RNiO}_2$ , *Phys. Rev. B* **106**, 165110 (2022).
6. A.S. Botana et al., Low valence nickelates: Launching the nickel age of superconductivity, *Front. Phys.* **9**, 813532 (2021).

## **ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИИ КОЛЛОИДНЫХ СИСТЕМ В ТРЕХМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ**

Широкова А.А.<sup>1,2</sup>, Кохановская А.В., Забавина П.А., Бондарева А.А.,  
Симкин И.В.<sup>1</sup>, Либет П.А.<sup>1</sup>, Яковлев Е.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия

<sup>2</sup> ИФВД РАН, Калужское ш., д.14, Москва, Россия  
*shirokova2001@yandex.ru, yakov.egor@gmail.com*

Коллоидные материи в настоящее время используются в качестве модельных систем [1] для изучения вопросов физики конденсированного состояния. Коллоидными системами возможно управлять при помощи внешних полей [2,3]. Таким образом, коллоидные суспензии используются для изучения фазовых переходов в системах [4], образования дефектов в кристаллах [5] и коллективной динамики [6]. На сегодняшний момент существует ряд способов для визуализации коллоидных систем в двумерном пространстве. Однако задача исследования коллоидных систем в трехмерном пространстве в режиме реального времени остается нерешенной.

В настоящей работе для изучения диффузии частиц в трехмерном пространстве была разработана экспериментальная система, в которой суспензия подсвечивалась сбоку при помощи плоскостного лазера. В качестве экспериментального образца использовались частицы полистирола диаметром 10,55 мкм в водном растворе

глицерина. Для того, чтобы научиться определять положение частицы по координате  $Z$ , были проведены пилотные эксперименты, в ходе которых фиксировался паттерн рассеяния света на частице на заданной высоте (рис. 1).

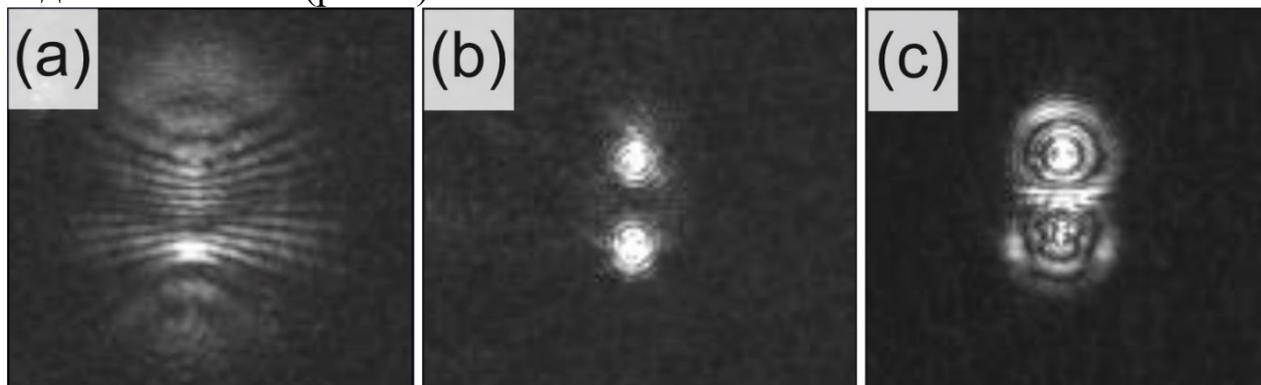


Рис. 1: Паттерны рассеяния света на частице: а) на расстоянии 15 мкм ниже объектной плоскости микроскопа; б) в объектной плоскости микроскопа; с) на расстоянии 15 мкм выше объектной плоскости микроскопа

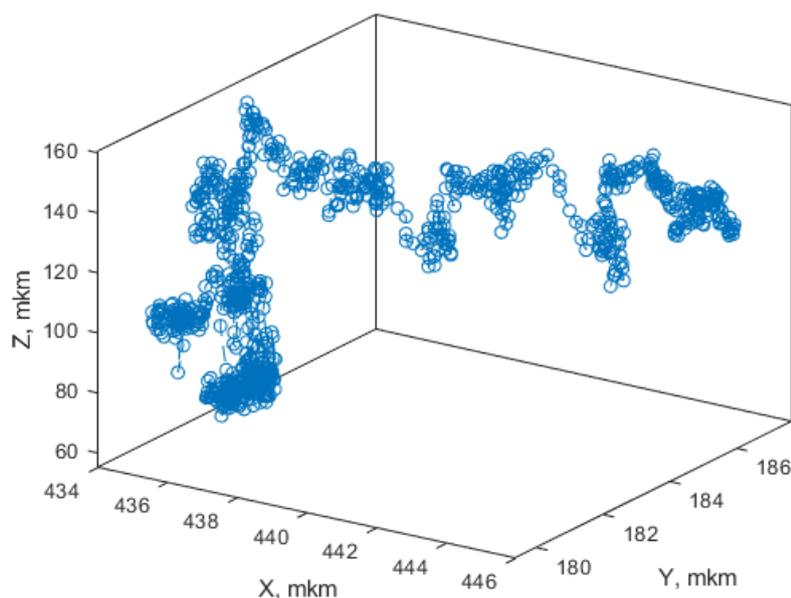


Рис. 2: Трекинг частицы полистирола в водном растворе глицерина

Для исследования диффузии коллоидных частиц проводились эксперименты, в которых велось видеонаблюдение за частицами. Полученные видео подвергались пост-обработке, в результате которых была восстановлена траектория частицы в трехмерном пространстве и определен коэффициент диффузии (рис. 2).

Результаты работы открывают возможности для визуализации системы трехмерных коллоидных суспензий. При использовании

внешних управляющих полей в таких системах становится возможным детально в эксперименте изучить на уровне отдельных частиц явления самоорганизации, кинетику фазовых переходов и другие коллективные явления в трехмерном пространстве.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-72-10128 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э. Баумана.

#### Литература

1. Anderson V. J. et al., Nature, **416**, 6883, 811-815, **2002**
2. Coughlan A. C. et al., Phys. Rev. E., **94**, 042613, **2016**
3. Yakovlev E. V. et al., J. of Colloid and Interface Sci., **608**, 564-574, **2022**
4. Du, D. et al., Soft Matter **13**, 8, 1548-1553, **2017**
5. Schall P. et al., Nature, **440**, 7082, 319-323, **2006**
6. Klapp S. H. L., Curr. Opin. Colloid Interface Sci., **21**, 76–85, **2016**

### КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ АМОРФНЫХ ЛЬДОВ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

А. А. Шуплецова<sup>1,2</sup>, В. В. Стегайлов<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> *Объединённый институт высоких температур РАН*

<sup>2</sup> *Московский физико-технический институт (НИУ)*

<sup>3</sup> *НИУ “Высшая школа экономики”*

*garkul.aa@phystech.edu*

Необычное поведение упругих модулей аморфных льдов H<sub>2</sub>O и D<sub>2</sub>O, обнаруженное в эксперименте [1, 2], требует более подробного изучения структурных особенностей аморфных льдов на микроскопическом уровне.

Как известно, на многие микроскопические свойства воды и льда сильное влияние оказывают квантово-механические эффекты. Одним из перспективных подходов для учета квантовой природы ядер в моделировании является Фейнмановский формализм квантовой механики.

В работе рассмотрены аморфные льды H<sub>2</sub>O и D<sub>2</sub>O в рамках молекулярно-динамического моделирования на интегралах по траекториям для модели воды q-TIP4P/F [3]. Результаты моделирования отражают основные экспериментально наблюдаемые

особенности колебательных спектров аморфных льдов [4], а также изотопический эффект в либрационной полосе. Полученные барические зависимости модулей всестороннего сжатия аморфных льдов H<sub>2</sub>O и D<sub>2</sub>O сопоставляются с классическим рассмотрением и с экспериментом [2].

### Литература

1. Gromnitskaya E. L. et al. Elastic properties of D<sub>2</sub>O ices in solid-state amorphization and transformations between amorphous phases //Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. – 2003. – Т. 78. – С. 488-492.
2. Gromnitskaya E. L. et al. Influence of isotopic disorder on solid state amorphization and polyamorphism in solid H<sub>2</sub>O–D<sub>2</sub>O solutions //Physical Review B. – 2015. – Т. 92. – №. 13. – С. 134104.
3. Habershon S., Markland T. E., Manolopoulos D. E. Competing quantum effects in the dynamics of a flexible water model //The journal of chemical physics. – 2009. – Т. 131. – №. 2. – С. 024501.
4. Kolesnikov A. I. et al. Vibrational dynamics of amorphous ice //Physical Review B. – 1999. – Т. 59. – №. 5. – С. 3569.

## **ФРУСТРИРОВАННЫЕ СВОЙСТВА РАЗБАВЛЕННОГО ИЗИНГОВСКОГО МАГНЕТИКА**

Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д.

<sup>1</sup> *Уральский федеральный университет имени первого Президента  
России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург  
daria.iasinskaia@urfu.ru*

Низкоразмерные магнитные структуры могут демонстрировать длительные времена релаксации намагниченности, обусловленные сочетанием одноосной анизотропии и сильных магнитных взаимодействий. Благодаря этому при конечных температурах такие магнетики находят применение в приложениях квантовых вычислений [1] и спинтроники.

Присутствие в системе анизотропии и фрустрации приводит к наличию богатых фазовых диаграмм и к таким необычным явлениям как магнитные плато [2], квазифазы и псевдопереходы [3], а также усиление магнетокалорического эффекта [4]. Присутствие беспорядка

также существенно влияет на фазовые, критические и магнитные свойства систем, а также является источником фрустрации. Наличие фрустрированных фаз при условии выполнения критерия Рохаса [5] способно приводить к наличию такого тонкого псевдокритического явления как псевдопереходы. Они сопровождаются скачкообразным изменением типа неупорядоченного состояния системы, при котором некоторые термодинамические функции демонстрируют очень резкие особенности, хотя и остаются непрерывными.

Рассматривается низкоразмерная модель Изинга с анизотропией и взаимодействующими заряженными примесями со следующим гамильтонианом:

$$\mathcal{H} = \Delta \sum_{i=1}^N S_{i,z}^2 + V \sum_{\langle ij \rangle} S_{i,z} S_{j,z} + J \sum_{\langle ij \rangle} P_{i,0} S_{i,z} S_{j,z} P_{j,0} - h \sum_{i=1}^N P_{i,0} S_{i,z} - \mu \sum_{i=1}^N S_{i,z},$$

где  $S=1$  – изинговский псевдоспин, связанный с зарядовыми степенями свободы;  $s=1/2$  – изинговский спин;  $\Delta$  – одноузельные заряд-зарядовые корреляции;  $V$  – межузельные заряд-зарядовые корреляции;  $J$  – спиновый обмен;  $h$  – внешнее магнитное поле;  $\mu$  – химический потенциал, с помощью которого фиксируется плотность суммарного заряда примесей в системе:  $nN = \sum_{i=1}^N S_{i,z}$ .

Анализ основного состояния системы показал наличие восьми нетривиальных фаз. Ферро- и антиферромагнитная фазы имеют макроскопическое фазовое расслоение с каплей из одноименных зарядов и нулевую остаточную энтропию. Остальные шесть фаз имеют ненулевую остаточную энтропию, зависящую от плотности заряда  $n$ , а значит, они являются фрустрированными фазами.

Вблизи границы между шахматной зарядовой фазой и ферро- или антиферромагнитной фазой в одномерной системе выполняется критерий Рохаса, что свидетельствует о наличии в системе псевдопереходов. Действительно, в одномерной системе в этой области обнаруживаются необычные особенности поведения термодинамических величин. При  $n=0$  наблюдаются псевдопереходы, напоминающие фазовые переходы I рода. Похожие псевдопереходы были обнаружены во многих других одномерных фрустрированных системах [5]. Однако при  $n \neq 0$  был обнаружен новый тип псевдоперехода, напоминающий фазовый переход II рода. Это связано с наличием макроскопического фазового расслоения в магнитной фазе. Анализ критических свойств двумерной модели вблизи границы, для которой наблюдались псевдопереходы, показал наличие фазовых переходов I рода. Можно сделать вывод о связи

псевдокритических свойств одномерной системы с особенностями критического поведения двумерной системы.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС», а также Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект FEUZ-2023-0017.

### Литература

1. C. Coulon, H. Miyasaka, R. // *Clérac Struct. Bond* **122**, 163 (2006).
2. E. Aydiner *et al.* // *Phys. Status Solidi B* **243**, 2901 (2006).
3. S.M. de Souza, O. Rojas // *Solid State Commun.* **269**, 131 (2017).
4. M.E. Zhitomirsky // *Phys. Rev. B* **67**, 104421 (2003).
5. O. Rojas // *Acta Phys. Pol. A* **137**, 933 (2020).



*Научное издание*

XXII Всероссийская конференция  
«Проблемы физики твердого тела и высоких давлений»

Тезисы  
24 сентября – 3 октября 2023 г.

Главный редактор П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН)  
Ответственный редактор В. Е. Анкудинов к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

*Авторская редакция*

Подписано в печать . Формат 60×84 1/16.  
П. л. . Тираж 120 экз.

Издательство Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук  
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 53