



**XXI Всероссийская конференция**

**ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ  
ТВЁРДОГО ТЕЛА  
И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ**

**Сочи, пансионат «Буревестник»  
23 сентября – 2 октября 2022 г.**

**ТЕЗИСЫ**

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

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

г. Сочи, пансионат «Буревестник»  
23 сентября – 2 октября 2022 г.

ТЕЗИСЫ

Москва, ФИАН 2022

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

Главный редактор В. Н. Рыжов д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)  
Ответственный редактор В. Е. Анкудинов к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

**Редакционная коллегия:** В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН); П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН); 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 XXI Всероссийской конференции, г. Сочи, пансионат «Буревестник», 23 сентября – 2 октября 2022 г. – Москва–Сочи: Изд-во ФИАН, 2022. – 167 с.

Problems of solid state physics and high pressure science:  
Abstracts of the XXI All-Russian Conference, Sochi, “Burevestnik” pension, September, 23 – October, 2, 2022. – Moscow–Sochi: LPI RAS Publ., 2022. – 167 p.

**ISBN 978-5-902622-45-1**

XXI 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 978-5-902622-45-1**

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

© Коллектив авторов, 2022  
© ФИАН, 2022

## 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 2022 году Конференция будет 21-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 сайте XXI Конференции:

<http://hppi.troitsk.ru/meetings/school/XXI-2022/inform-22.htm>



## **ОРГАНИЗАТОРЫ**

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

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

Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова

## **ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ**

1. Председатель – В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
2. Сопредседатель – П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН)
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. В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
4. П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН)
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
ОРГАНИЗАТОРЫ .....	4
СОДЕРЖАНИЕ .....	5
УГЛОВЫЕ МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ $Ce_xLa_{1-x}B_6$ <u>Азаревич А.Н.</u> , Богач А.В., Глушков В.В., Демишев С.В., Шицевалова Н.Ю., Половец С., Филиппов В.Б., Габани С., Качмарчик Й., Флахбарт К., Случанко Н.Е.....	16
ОБ ОСОБЕННОСТЯХ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Ni-Mn-In В ЦИКЛИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ <u>Алиев А.М.</u> , Гамзатов А.Г.....	18
БИОСОВМЕСТИМЫЙ ПОРИСТЫЙ СВС-МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА С МИКРОПОРИСТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ СТЕНОК ПОР <u>Аникеев С.Г.</u> , Артюхова Н.В., Кафтаранова М. И., Ходоренко В.Н., Мамазакиров О.....	19
TRANSPORT AND MAGNETIC PROPERTIES OF $Sm_{1-x}Eu_xB_6$ FAMILY <u>Anisimov M.</u> , Samarin N., Bogach A., Azarevich A., Demishev S., Voronov V., Shitsevalova N., Levchenko A., Filipov V., and Glushkov V. <sup>1</sup> .....	21
ВРЕМЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В МОДЕЛИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПОЛЯ <u>Анкудинов В. Е.</u> .....	22
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДАВЛЕНИЯ ПЕСКА В АППАРАТЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ <u>Антанович А.А.</u> .....	24

ЛИНЕЙНОСТЬ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ СТАНДАРТНОЙ ЭНЕРГИИ ГИББСА У ИЗОМОРФНЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ <b>Антонов В. Е., Музалевский В. Д., Орлов Н. С.</b> .....	26
РАЗРАБОТКА СПОСОБА МОДИФИКАЦИИ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА СВС МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ TiNi <b>Артюхова Н.В., Аникеев С.Г., Кафтгаранова М. И., Ходоренко В.Н.</b> ..	28
ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ БОЗЕ-КОНДЕНСАТА В СИСТЕМЕ ДВУМЕРНЫХ КВАЗИЧАСТИЦ <b>Асриян Н.А., Елистратов А.А., Лозовик Ю.Е.</b> .....	30
СИНТЕЗ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ АЛМАЗОВ С ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫМИ ЦЕНТРАМИ <b>Баграмов Р. Х.</b> .....	31
ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ ТЕМПЕРАТУРЫ НА РАЗМЫТИЕ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА <b>Баева Э. М.</b> .....	32
ВЫЧИСЛЕНИЕ СВОЙСТВ СТЕКЛООБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМ ПРИ ПОМОЩИ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ <b>Балякин И.А., Рыльцев Р.Е.</b> .....	34
ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СПЛАВОВ Mg–Al ПРИ НОРМАЛЬНОМ ДАВЛЕНИИ <b>Баталова Е. А., Камаева Л. В., Щелкачев Н. М.</b> .....	35
СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА, СПЕКТРОСКОПИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ, РТ-ДИАГРАММЫ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ БОРАТОВ БАРИЯ <b>Беккер Т. Б., Сагатов Н. Е., Подбородников И. В., Литасов К. Д.</b>	37
ДВУМЕРНЫЕ ЭЛЕКТРОНЫ НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ <b>Бисти В.Е.</b> .....	39

SeV<sub>6</sub>: КОНДО-РЕШЕТКА ИЛИ СОЕДИНЕНИЕ С МАГНИТНЫМИ КЛАСТЕРАМИ. НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

**Богач А.В., Болотина Н.Б., Хрыкина О.Н., Азаревич А.Н., Глушков В.В., Демишев С.В., Шицевалова Н.Ю., Половец С., Филипов В.Б., Воронов В.В., Случанко Н.Е..... 41**

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ РЕНОРМГРУППОВОЙ АНАЛИЗ ДВУХМЕРНОГО АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО КВАНТОВО-КРИТИЧЕСКОГО МЕТАЛЛА

**Борисов А. О., Боргес Ф., Синг А., Шлиф А., Ли С.С..... 43**

ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ ОГРАНИЧЕНИЕ НА МАКСИМАЛЬНУЮ СКОРОСТЬ ЖИВЫХ СУЩЕСТВ И МЕХАНИЗМОВ.

**Бражкин В.В..... 43**

СТЕКОЛЬНЫЙ ПЕРЕХОД КАК ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В УПРУГОЙ СРЕДЕ

**Васин М. Г., Шкляев К. Я..... 44**

ПЛАВЛЕНИЕ И СТРУКТУРИЗАЦИЯ В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ ЧАСТИЦ С ГАУССОВЫМ ПИННИНГОМ

**Гайдук Е. А., Рыжов В. Н., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н..... 46**

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СПЛАВЕ Ni<sub>62</sub>Nb<sub>38</sub> ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

**Галимзянов Б. Н., Доронина М. А., Мокшин А. В. .... 48**

ДИНАМИКА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА В ЦИКЛИЧЕСКИХ (ДО 80 КЭ) И В ИМПУЛЬСНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ (ДО 500 КЭ)

**Гамзатов А.Г., Алиев А.М., Каманцев А.П., Кошкидько Ю.С., Быков Э.О..... 49**

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА НА ИНТЕГРАЛАХ ПО ТРАЕКТОРИЯМ ДЛЯ АМОРФНЫХ ЛЬДОВ

**Гаркуль А. А., Кондратюк Н. Д. и Стегайлов В. В..... 51**

О ВОЗМОЖНОСТИ ЗНАЧИТЕЛЬНОГО УВЕЛИЧЕНИЯ ВРЕМЕНИ ХРАНЕНИЯ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ В ЛОВУШКАХ, ПОКРЫТЫХ ПЛЕНКОЙ ЖИДКОГО ГЕЛИЯ

**Григорьев П. Д..... 52**

ТЕОРИЯ КОСВЕННЫХ ОБМЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ,  
ОПИСЫВАЮЩАЯ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МУЛЬТИСЛОЕВ  
ЖЕЛЕЗО-ХРОМ, ОБЛАДАЮЩИХ ЭФФЕКТОМ ГИГАНТСКОГО  
МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ

**Гудин С.А.**..... 53

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ВЕРТИКАЛЬНЫХ СТРУН  
КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ  
ПОЛЯХ

**Гурский К.Д., Юрченко С.О., Крючков Н.П.**..... 55

СПИН-ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МАГНЕТИКАХ

**Демишев С.В.**..... 57

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ САХАРОВ МЕТОДОМ  
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

**Дещеня В. И., Кондратюк Н. Д., Ланкин А. В., Норман Г. Э.**..... 59

СПИНОВАЯ ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА, СОЗДАННАЯ НА  
ОСНОВЕ РАБОТЫ ВАКСА, ЛАРКИНА, ПИКИНА, В ЗАДАЧАХ  
АНАЛОГОВОГО КВАНТОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

**Елистратов А.А.**..... 61

ОСОБЕННОСТИ РАСПАДА РАСТВОРОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО  
ВОДОРОДА В ЛИТИЙ-СИЛИКАТНОМ СТЕКЛЕ

**Ефимченко В.С., Короткова М.А., Мелетов К.П.**..... 62

ЭФФЕКТ ХОЛЛА В ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ  $\text{SmB}_6$

**Журкин В.С., Божко А.Д., Азаревич А.Н., Исхакова Л.Д.,  
Воронов В.В., Шицевалова Н.Ю., Глушков В.В.**..... 64

ЭФФЕКТ ЛИТТЛА-ПАРКСА В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ  
ГИБРИДНЫХ СИСТЕМАХ СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

**Залян О.В., Путилов А.В., Мельников А.С.**..... 66

ОСОБЕННОСТИ РАСЧЁТА ОСНОВНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ  
РЕЗУЛЬТАТИВНОСТИ НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ В  
СОВРЕМЕННОЙ ДЕЙСТВИТЕЛЬНОСТИ

**Захарова Е.В., Борзенкова Е.И.**..... 69

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА МОДИФИКАЦИИ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ VO<sub>2</sub>(S)

**Зибров И.П., Филоненко В.П., Сидоров В.А., Щелкачев Н.М., Магницкая М.В...... 70**

МАЙОРАНОВКИЕ МОДЫ НА РАЗЛИЧНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТАХ 2D СВЕРХПРОВОДНИКОВ

**Злотников А. О., Аксенов С. В., Федосеев А. Д., Шустин М. С..... 72**

ВЛИЯНИЯ ДАВЛЕНИЯ И СКОРОСТИ ОХЛАЖДЕНИЯ НА ОБРАЗОВАНИЕ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В СПЛАВАХ Al-Cu-Fe

**Камаева Л. В., Суслов А. А., Шутов И. В., Бражкин В. В. ..... 74**

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОГРАНИЧЕНИЯ

**Капуткина Н. Е., Алтайский М. В...... 76**

СПОСОБЫ ОПТИМИЗАЦИИ МАКРО- И МИКРОСТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОРИСТОГО СПЛАВА НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА

**Кафтаранова М. И., Аникеев С.Г., Артюхова Н.В., Ходоренко В.Н. . 77**

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ С ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЁТКОЙ PdCrO<sub>2</sub>

**Комлева Е. В., Ирхин В. Ю., Стрельцов С. В...... 79**

ДЕКОРИРОВАНИЕ АЛМАЗА МЕТАЛЛОМ ДЛЯ СОЗДАНИЯ МЕТАПОВЕРХНОСТИ ИК ДИАПАЗОНА

**Комленок М. С., Попович А. Ф., Курочицкий Н. Д., Седов В. С., Клименко О. А., Тиходеев С. Г...... 80**

КВАНТОВАЯ ПРИРОДА ЯДЕР ЧЕРЕЗ ИНТЕГРАЛЫ ПО ТРАЕКТОРИЯМ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКЕ

**Кондратюк Н.Д. ..... 82**

ВЛИЯНИЕ МЕЖСЛОЕВОГО СПАРИВАНИЯ НА НАВЕДЕННУЮ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И МЕЙССНЕРОВСКИЙ ОТКЛИК ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

**Копасов А. А., Мельников А. С...... 83**



СИНТЕЗ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ  
АЭРОГЕЛЯ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ С ВКЛЮЧЕНИЯМИ  
УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ АЛМАЗОВ

**Короткова М.А.**..... 85

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ АНИЗОТРОПНЫХ  
КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ  
ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

**Корсакова С. А., Насыров А. Д. и Крючков Н.П.**..... 87

НОРМАЛЬНЫЙ И АНОМАЛЬНЫЙ ВКЛАДЫ В ЭФФЕКТ ХОЛЛА  
В ПАРАМАГНИТНОЙ ФАЗЕ  $\text{Ho}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{V}_{12}$  С ДИНАМИЧЕСКИМИ  
ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ

**Красиков К.М., Хорошилов А.Л., Глушков В.В., Демишев С.В.,  
Краснорусский В.Н., Шицевалова Н.Ю., Филипов В.Б.,  
Случанко Н.Е.** ..... 89

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА  
 $\text{RhMnFeCoGe}_4$  (B20)

**Цвященко А.В., Краснорусский В.Н., Боков А.В., Сидоров В.А.,  
Саламатин Д.А., Семенов А.В., Бражкин В.В.** ..... 91

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ АНИЗОТРОПНЫХ  
КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ  
ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

**Крючков Н.П., Гурский К.Д., Насыров А.Д., Юрченко С.О.**..... 93

КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ В 2D КОЛЛОИДНЫХ ЖИДКОСТЯХ  
ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

**Кушнир И.А., Крючков Н.П., Яковлев Е.В., Юрченко С.О.** ..... 95

ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ ИЗВЛЕЧЕНИЯ ЛИТИЯ ИЗ БЕДНЫХ  
РАССОЛОВ

**Ланкин А. В.** ..... 96

РЕГУЛИРУЕМАЯ КОЛЛОИДНАЯ САМОСБОРКА С  
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТРЁХМЕРНЫХ КОНИЧЕСКИХ  
МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

**Либет П. А., Широкова А. А., Симкин И. В., Яковлев Е.В. и  
Юрченко С.О.**..... 98

ОБРАЗОВАНИЕ, ДИФФУЗИЯ И РОСТ ГАЗОНАПОЛНЕННЫХ ПУЗЫРЬКОВ В ГАММА-УРАНЕ ПРИ ИЗБЫТКЕ МЕЖДОУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ: СВЯЗЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И КИНЕТИКИ

**Е.А. Лобашев, А.С. Антропов, В.В. Стегайлов ..... 100**

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХЛОРСОДЕРЖАЩЕГО ДВОЙНОГО ГИДРОКСИДА АЛЮМИНИЯ И ЛИТИЯ

**Лукьянчук В. Г., Ланкин А. В., Норман Г.Э. ..... 101**

СИНТЕЗИРОВАННЫЕ ПОД ДАВЛЕНИЕМ СОЕДИНЕНИЯ 3d-МЕТАЛЛОВ С РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ И ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ

**Магницкая М. В., Боков А. В., Саламатин Д. А., Щелкачев Н. М., Крылов В. И., Цвященко А. В...... 102**

ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ НА ЭЛЕКТРИДНЫХ СОСТОЯНИЯХ МАЙЕНИТА  $[Ca_{24}Al_{28}O_{64}]^{4+}(e^-)_4$

**Мазанникова М. А., Новоселов Д. Ю., Коротин Д. М., Анисимов В. И...... 104**

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОБАРИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА БИНАРНЫХ И МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ А1-ПМ-РЗМ, ВКЛЮЧАЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ, ПРИ БЫСТРОМ ОХЛАЖДЕНИИ ИХ РАСПЛАВОВ

**Меньшикова С. Г., Бражкин В. В...... 106**

ТЕМПЕРАТУРНАЯ МНОГОЧАСТИЧНАЯ ЗАПУТАННОСТЬ

**Михеенков А. В., Валиулин В.Э., Кугель К. И., Щелкачев Н.М..... 107**

МАГНИТНЫЕ КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ ВНУТРИСЛОЕВОЙ ПРОВОДИМОСТИ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ МЕТАЛЛАХ

**Могилюк Т. И., Григорьев П. Д...... 110**

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В РЕШЕНИИ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

**Мокшин А.В. ..... 111**

ОБОБЩЕНИЕ ИНТЕРПОЛЯЦИОННОГО МЕТОДА КРАТЧАЙШИХ ГРАФОВ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПАРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ЖИДКОСТЯХ

**А.Д.Насыров, Н.П.Крючков, Е.В.Яковлев, И.А.Кушнир, И.В.Симкин, С.О.Юрченко .....** 112

О НОВОМ КЛАССЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА

**Норман Г. Э., Сайтов И. М. ....** 113

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ В РЯДЕ  $Co$  СОДЕРЖАЩИХ ИЗОСТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ ЖЕЛЕЗНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

**Павлов Н. С., Шеин И. Р., Перваков К. С., Некрасов И. А.....** 115

ЛОКАЛИЗОВАННАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И ДИОДНЫЙ ЭФФЕКТ В СИСТЕМАХ СВЕРХПРОВОДНИК / ФЕРРОМАГНЕТИК СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

**Путилов А. В., Миронов С. В., Буздин А. И. ....** 117

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ПАРАМЕТРЫ БЕСФОНОННОЙ ЛИНИИ  $GeV$  ЦЕНТРОВ В АЛМАЗЕ В ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР 20-180К

**А.А. Разгулов, С.Г. Ляпин, А.П. Новиков, Е.А Екимов .....** 119

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СПЛАВА АЛТЭК ПОСЛЕ РАДИАЛЬНО-СДВИГОВОЙ ПРОКАТКИ

**Распоиенко Д. Ю., Петрова А. Н., Астафьев В. В., Яковлева А. О... 121**

ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ УСИЛЕНИЕ: ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЕ ОПИСАНИЕ НА ОСНОВЕ ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКИ ШВИНГЕРА-КЕЛДЫША

**Ремизов С.В., Елистратов А.А.....** 123

САМООРГАНИЗАЦИЯ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ – РОЛЬ ТРАНСЛЯЦИОННОГО И ОРИЕНТАЦИОННОГО ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА

**Рыжов В. Н., Гайдук Е. А., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.....** 125

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ ЖИДКОСТЕЙ 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..... 127

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИСТЕМЫ НА КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

Савилов Т. М., Ланкин А. В., Смирнов Г. С., Норман Г. Э..... 129

ВЛИЯНИЕ УЧЕТА НУЛЕВЫХ КОЛЕБАНИЙ НА ПАРАМЕТРЫ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОВОДЯЩЕГО СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Саитов И. М...... 130

НОВОЕ ПРОМЕЖУТОЧНО-ВАЛЕНТНОЕ СОЕДИНЕНИЕ  $YbZn_2$

Саламатин Д.А., Клементьев К.Е., Магницкая М.В., Щелкачев Н.М., Сидоров В.А., Козин М.Г., Ромашкина И.Л., Николаев А.В., Будзинский М., Цвященко А.В..... 131

СОСТОЯНИЕ “СВЯЗАННОЙ СВЕТИМОСТИ” В РАСШИРЕННОЙ МОДЕЛИ ДИКЕ

Сеидов С. С., Мухин С. И..... 133

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ДЛИН В ДВУМЕРНЫХ ЖИДКОСТЯХ С ПОТЕНЦИАЛОМ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА

Симкин И.В., Яковлев Е.В., Крючков Н.П., Корсакова С.А., Широкова А.А., Юрченко С.О..... 135

ПЕРЕХОДЫ МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР И ЗАРЯДОВЫЕ СТРАЙПЫ В КОНДО-ИЗОЛЯТОРЕ  $YbV_{12}$  И ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ЕГО ОСНОВЕ

Случанко Н.Е., Азаревич А.Н. .... 137

КЛАССИФИКАЦИЯ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Сон Л. Д...... 139

МАГНЕТИТ: ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ И ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ С УЧЕТОМ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ  
Стегайлов В.В., Шутикова М.И...... 140

ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДА НА ФАЗООБРАЗОВАНИЕ В РАСПЛАВАХ  $Fe_{85-x}Cr_{15}C_x$  ( $x=10-17$ ) ПРИ НЕБОЛЬШИХ СКОРОСТЯХ ОХЛАЖДЕНИЯ  
Стерхова И.В., Камаева Л.В., Щелкачев Н.М., Ладьянов В.И. .. 142

ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ МАГНИТНЫХ И МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ FE ЛАНГАСИТОВ  
Тихановский А.Ю., Иванов В.Ю., Кузьменко А.М., Попов Ю.Ф., Воробьев Г.П., Мухин А.А. ..... 144

ЭКСИТОННЫЙ МЕХАНИЗМ ПЛАЗМЕННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ПЛОТНОМ ФЛЮИДЕ ВОДОРОДА: АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ НА ОСНОВЕ НОВОЙ ТЕОРИИ  
Федоров И.Д., Стегайлов В.В. ..... 146

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ СПЕКАНИЕМ АЛМАЗНЫХ ПОРОШКОВ С ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ  
Филоненко В.П...... 147

ПЕРЕХОД В СТЕКЛО В МОНОАТОМНЫХ СИСТЕМАХ: РАЗМЫВАНИЕ ОДНОЙ СТРУКТУРЫ ИЛИ КОНКУРЕНЦИЯ СТРУКТУР  
Фомин Ю.Д., Циок Е.Н., Рыжов В.Н. и Бражкин В.В. ..... 149

ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ В МОДЕЛИ ПЛЁНКИ  $FeO$ : РАВНОВЕСНЫЕ КОНЦЕНТРАЦИИ, ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ И ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ  
Фоминых Н.А., Стегайлов В.В...... 150

ПОСТРОЕНИЕ СЕМЕЙСТВА СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ГРУППЫ ЖИДКИХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ  
Хабибуллин Р. А., Мокшин А. В...... 151

МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ  
РАСПЛАВОВ Al-Cu С ПОМОЩЬЮ ПОТЕНЦИАЛОВ ГЛУБОКОГО  
МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Хазиева Е.О., Типеев А.О., Щелкачев Н.М., Рыльцев Р.Е...... 152

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА ВОДЫ

Хуснутдинов Р.М., Хайруллина Р.Р...... 154

ВЛИЯНИЕ ЖЕСТКОСТИ И ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ  
МЕЖЧАСТИЧНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРНЫЕ  
ХАРАКТЕРИСТИКИ КОЛЛОИДНЫХ СИСТЕМ В КОНИЧЕСКИХ  
ВРАЩАЮЩИХСЯ ПОЛЯХ

Циок Е.Н., Фомин Ю.Д., Гайдук Е.А., Тареева Е.Е., Рыжов В.Н.,  
Широкова А.А., Кушнир И.А., Денисенко И.Р., Крючков Н.П.,  
Юрченко С.О...... 156

САМОСБОРКА МАГНИТНЫХ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ВО  
ВРАЩАЮЩЕМСЯ КОНИЧЕСКОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ ПРИ  
РАЗЛИЧНЫХ УГЛАХ ПРЕЦЕССИИ

Широкова А.А., Симкин И.В., Либет П.А., Яковлев Е.В.,  
Юрченко С.О...... 157

МАЙОРАНОВКИЕ УГЛОВЫЕ МОДЫ В ДВУМЕРНЫХ  
СВЕРХПРОВОДНИКАХ С КУЛОНОВСКИМ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Аксенов С. В., Злотников А.О., Федосеев А. Д., Шустин М. С.... 159

ВЛИЯНИЯ ГОСТЕВЫХ МОЛЕКУЛ НА СТАБИЛЬНОСТЬ  
ГИДРАТА С КОНФИГУРАЦИЕЙ SI

Юнусов М.Б., Хуснутдинов Р.М. ..... 161

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАЗБАВЛЕННОЙ ОДНОМЕРНОЙ  
МОДЕЛИ ИЗИНГА

Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д...... 164



## УГЛОВЫЕ МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ $Ce_xLa_{1-x}B_6$

Азаревич А.Н.<sup>1,2</sup>, Богач А.В.<sup>1</sup>, Глушков В.В.<sup>1</sup>, Демишев С.В.<sup>1</sup>,  
Шицевалова Н.Ю.<sup>3</sup>, Половец С.<sup>3</sup>, Филиппов В.Б.<sup>3</sup>, Габани С.<sup>4</sup>,  
Качмарчик Й.<sup>4</sup>, Флахбарт К.<sup>4</sup>, Случанко Н.Е.<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>*Московский Физико-Технический Институт, Долгопрудный, Россия*

<sup>3</sup>*Институт проблем материаловедения им. И.Н.Францевича НАНУ,  
Киев, Украина*

<sup>4</sup>*Институт Экспериментальной Физики САН, Кошице, Словакия  
azarevich@lt.gpi.ru*

Твердые растворы замещения  $Ce_xLa_{1-x}B_6$  в интервале составов  $x > 0.5$  считаются тяжело-фермионными соединениями с достаточно сложной магнитной фазовой диаграммой, включающей необычные магнитные фазы с орбитальным и антиферромагнитным упорядочением (фазы II-IV), мультипольными взаимодействиями различных порядков и ферромагнитными спиновыми флуктуациями [1]. Как было недавно показано, борная подрешетка в гексаборидах оказывается динамически неустойчивой, причем эта ян-теллеровская неустойчивость кластеров  $B_6$  приводит к появлению коллективных возбуждений на частотах в инфракрасном диапазоне, обуславливая также квазилокальные колебания редкоземельных ионов, и вызывая модуляцию электронной плотности в зоне проводимости с переходом значительной части носителей заряда (например, около 70% в  $Gd_xLa_{1-x}B_6$  [2]) в неравновесное состояние с сильным рассеянием. Исследуя структуру  $GdB_6$  методами прецизионной рентгеновской дифракции, авторы [3] показали, что столь сильное рассеяние возникает из-за формирования динамически связанных пар редкоземельных ионов и динамических зарядовых страйпов (полос флуктуирующих зарядов) вдоль направления  $[100]$  в кристаллической решетке. Похожее понижение симметрии (электронный нематический эффект) было обнаружено также и в  $CeB_6$  [4]. Указанные флуктуации заряда, которые рассматриваются как электронное фазовое расслоение наномасштаба, отвечают за подавление косвенного обменного взаимодействия между соседними ионами церия в направлении  $\langle 100 \rangle$ , что в значительной мере определяет заметные изменения в магнитной фазовой диаграмме  $Ce_xLa_{1-x}B_6$ .

В докладе мы представляем результаты прецизионных угловых измерений магнетосопротивления  $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{B}_6$  в интервале составов  $x > 0.6$  при сверхнизких температурах  $T \geq 0.5\text{K}$ . Полученные данные позволяют сделать вывод о нарушении кубической симметрии, появлении радиальных фазовых границ на магнитных фазовых диаграммах (см. вертикальные линии вдоль  $[110]$  и  $[111]$  на рисунке), а также выяснить ряд особенностей сложного антиферромагнитного упорядочения в  $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{B}_6$ .

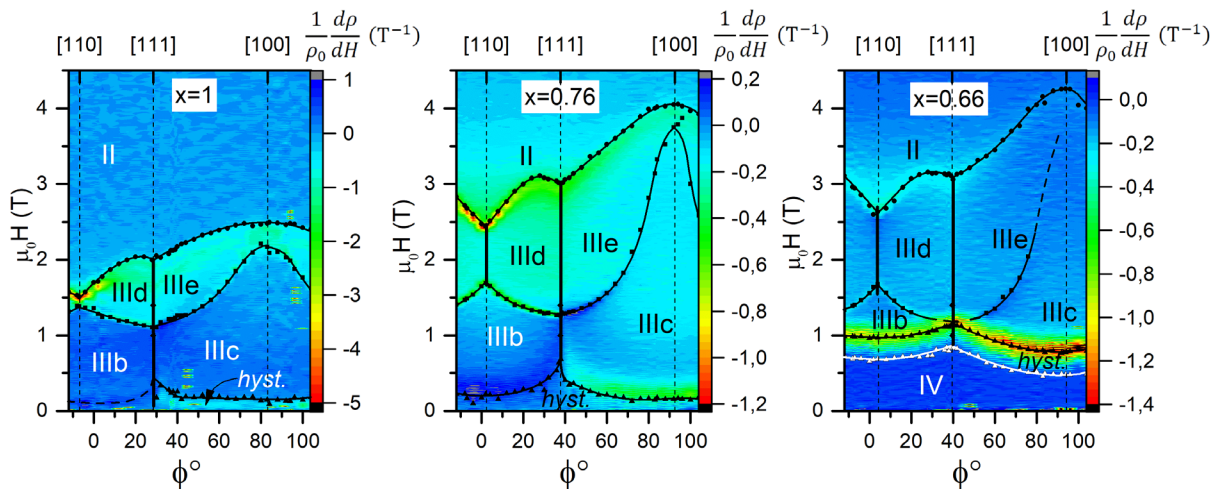


Рис.1. Угловые зависимости производных магнетосопротивления  $1/\rho_0 \frac{d\rho}{dH} = f(\phi, H)$  твердых растворов замещения  $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{B}_6$ .

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ № 22-22-00243 и Европейской Платформы Микрокельвин.

#### Литература

1. A. S. Cameron et al., Rep. Progr. Phys. **79**, 066502, **2016**
2. E. S. Zhukova et al., Phys. Rev. B **100**, 104302, **2019**
3. A. P. Dudka et al., Phys. Rev. B **100**, 205103, **2019**
4. S. V. Demishev et al., Sci. Rep. **7**, 17430, **2017**

# ОБ ОСОБЕННОСТЯХ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Ni-Mn-In В ЦИКЛИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Алиев А.М., Гамзатов А.Г.

*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН,*

*Махачкала, Россия*

*lowtemp@mail.ru*

Несмотря на активные исследования магнитокалорических свойств различных сплавов Гейслера, в этой области остается еще много нерешенных вопросов. В частности, отсутствует общепринятое объяснение различия значений магнитокалорического эффекта в области мартенситных фазовых переходов при нагреве и охлаждении. Проблема оценки вкладов структурной и решеточной подсистем в суммарный магнитокалорический эффект (МКЭ) в этих материалах остается нерешенной. Во многих сплавах Гейслера наблюдается сильная зависимость МКЭ от частоты изменения магнитного поля, также не находящая в настоящее время разумного объяснения. Кроме того, мало исследовано влияние длительного воздействия циклического магнитного поля на стабильность магнитокалорических свойств сплавов Гейслера, которое является важной задачей с практической точки зрения.

В данном сообщении представлены результаты исследования магнитокалорических свойств сплавов Гейслера Ni-Mn-X (X=In, Sn) в области магнитоструктурных (мартенситных) фазовых переходов в циклических (переменных) магнитных полях. Чтобы лучше понять эффекты, происходящие в сплавах Гейслера, также были изучены тепловое расширение этих материалов в постоянных магнитных полях, а также магнитострикция в циклических магнитных полях. На основе полученных результатов даются объяснения различия величины МКЭ в режимах нагрева и охлаждения, а также даются оценки вкладов структурной и магнитной подсистем в общий МКЭ. Обсуждаются возможные механизмы снижения МКЭ при увеличении частоты изменений поля. Приведены некоторые экспериментальные результаты, свидетельствующие о явлениях долговременной релаксации и деградирующем влиянии длительного воздействия переменного магнитного поля на свойства исследуемых материалов.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда №. 22-19-00610.

# БИОСОВМЕСТИМЫЙ ПОРИСТЫЙ СВС-МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА С МИКРОПОРИСТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ СТЕНОК ПОР

Аникеев С.Г., Артюхова Н.В., Кафттаранова М. И.,  
Ходоренко В.Н., Мамазакиров О.

*Национальный исследовательский Томский государственный  
университет  
Anikeev\_Sergey@mail.ru*

Пористые сплавы на основе никелида титана (TiNi) являются универсальным материалом с широким набором функциональных и конструкционных свойств за счет возможности применения широкого спектра технологических приемов в процессе его получения и обработки [1], используют различные температурно-временные режимы [2], проводят синтез в присутствии ультразвукового воздействия [3], применяют различные режимы СВС [4] и разное соотношение компонент в исходной порошковой шихте [5].

Дизайн порового пространства, которое взаимодействует с клеточными структурами при имплантации конструкции на основе TiNi, в организм человека является перспективным направлением для оптимизации параметров биосовместимости СВС-материала TiNi. Использование ярко выраженной фазовой неоднородности СВС-материала открывает перспективу для увеличения удельной поверхности за счет вытравливания частиц фаз оксикарбонитридов  $Ti_4Ni_2(O,N,C)$ . Данные частицы располагаются на поверхности стенок пор по границам зерен и реже в теле зерна. В связи с этим разработка методики химического травления для создания микропористой структуры поверхности стенок пор является актуальной задачей и имеет прикладное значение.

Пористые СВС-материалы на основе TiNi получают при температуре начала синтеза 400 °С с использованием шихты Ti-Ni в соотношении 1:1. Порошки просушивали в лабораторном вакуумном шкафу при температуре 60–70 °С в течение 4–8 ч. Время приготовления смеси в V-образном смесителе составляет 8 ч. Порошковую шихту засыпали в кварцевые трубки диаметром 50 мм и уплотняли в течение 30 мин до пористости 45–50 %. Кварцевую трубку с шихтой устанавливали в реактор и подвергали нагреву в трубчатой электрической печи типа СУОЛ в атмосфере аргона.

Обработку поверхности стенок пор выполняли растворами на основе азотной, плавиковой, серной, соляной, уксусной, ортофосфорной кислот при различных температурных и временных интервалах воздействия.

Исследование влияния предложенных обработок на структуру порового пространства выполнено методом растровой микроскопии. Изучены структурные особенности поверхности стенок пор и распределение частиц вторичных фаз  $Ti_4Ni_2(O,N,C)$  в сравнении с исходным необработанным материалом. Определено изменение коэффициента пористости, среднего размера пор и гистограмм распределения пор по размерам после химической обработки.

Установлено, что одним из перспективных составов для модификации порового пространства является состав на основе водного раствора плавиковой и азотной кислот. Доля микропор размером менее 50 нм выросла с 59 до 68 %, и количество пор более 1 мкм выросло в два раза с 11 до 22 %. При этом пористость и средний размер пор СВС-материала практически не меняются.

Избыточное травление приводит к нарушению регулярной пористой структуры. Путем послойного травливания матрицы  $TiNi$  и вытравливания частиц, обогащенных титаном, образуются новые поверхности стенок пор с микропорами. Макропоры значительно увеличиваются в размерах, и металлическая матрица деградирует за счет активных процессов травления межпоровых перегородок. Обнаружены тупиковые поры на поверхности стенок пор, внутри которых находятся микропоры. Необходимо проводить химическую обработку с наименьшей продолжительностью для исключения вытравливания соединения  $TiNi$ .

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

## Литература

1. M.H. Elahinia et.al., Prog. Mater. Sci. **57**, 911, **2012**.
2. S.G. Anikeev et.al., Mater. Res. Express. **6**, 026570, **2019**.
3. N.N. Resnina et al., Let. on Mater. **12**, 2, **2022**.
4. А.П. Амосов, И.П. Боровинская, А.Г. Мержанов, «Порошковая технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов», 1, **2007**.
5. N.N. Resnina et al., Intermetall. **32**, **2013**.

# TRANSPORT AND MAGNETIC PROPERTIES OF $\text{Sm}_{1-x}\text{Eu}_x\text{B}_6$ FAMILY

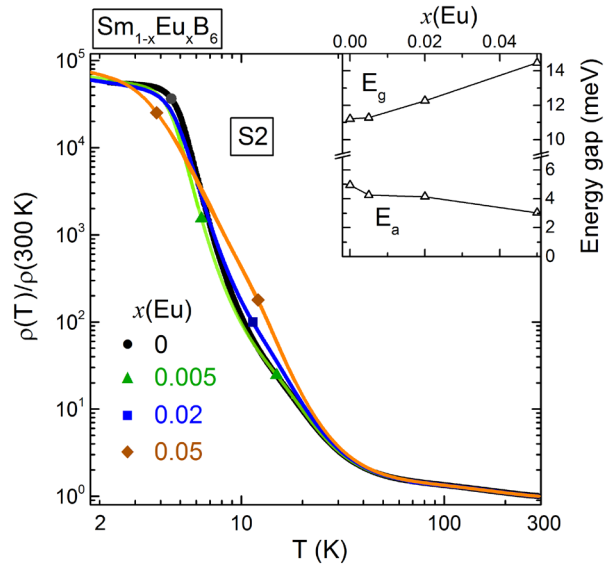
Anisimov M.<sup>1</sup>, Samarin N.<sup>1</sup>, Bogach A.<sup>1</sup>, Azarevich A.<sup>1</sup>, Demishev S.<sup>1</sup>,  
Voronov V.<sup>1</sup>, Shitsevalova N.<sup>2</sup>, Levchenko A.<sup>2</sup>, Filipov V.<sup>2</sup>, and  
Glushkov V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Prokhorov General Physics Institute of the RAS, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Frantsevich Institute for Problems of Materials Science, NASU,  
Kiev, Ukraine*

*E-mail: anisimov.m.a@gmail.com*

The system  $\text{SmB}_6$  having long-lasting history of investigation is discussed in literature as possible candidate for 3D topological insulators [1]. Nowadays the popular tendency in  $\text{SmB}_6$  physics is the study of samarium-deficient samples as well as diluted materials with divalent or trivalent impurity substitution. A chemical doping of  $\text{SmB}_6$  matrix with magnetic  $\text{Eu}^{2+}$  ions should modify considerably the position of Fermi level  $E_F(x)$  and consequently the physical properties of the host compound. Here we report a detailed investigation of transport (resistivity, magnetoresistance, Hall effect) and magnetic properties of high quality  $\text{Sm}_{1-x}\text{Eu}_x\text{B}_6$  single crystals [ $x(\text{Eu})=0, 0.005, 0.02, 0.05$ ] at temperatures 2–300 K in magnetic fields up to 8 T. In order to elucidate surface effects, two different states of surface (S1 and S2) were examined for each sample. The mirror-like state (S1) was obtained by polishing crystals with diamond powders with the grain size varied gradually from 7 microns to 1 micron. The state S2 has been prepared by chemical etching of the S1 surface in the 1:10 mixture of the nitric acid and distilled water.



The  $x$ -evolution of energetic spectra in  $\text{Sm}_{1-x}\text{Eu}_x\text{B}_6$  is estimated based on two-gap paradigm [2]. Our data show that both the  $4f$  lattice coherence and intrinsic gap ( $E_a$ ) related to many-body states survive with Eu-substitution (at least up to  $x=0.05$ ). In particular, in the studied interval of concentrations the calculated  $E_g(x)$  function (*i*) rises gradually with  $x(\text{Eu})$  from reference value of  $E_g \approx 11.2$  meV in  $\text{SmB}_6$  up to  $E_g \approx 14.4$  meV in



$\text{Sm}_{0.95}\text{Eu}_{0.05}\text{B}_6$  (inset in Fig.1). Interestingly, (ii) we do observe the presence of the ‘small’ gap  $E_a$  in  $\text{Sm}_{1-x}\text{Eu}_x\text{B}_6$  even for 5 % Eu-compound where  $E_a \approx 3$  meV (Fig.1). Note that the depression of this intrinsic gap is also accompanied by (iii) a strong reduction of Hall mobility  $\mu_H(T, H=7 \text{ T})$  from  $74 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  ( $\text{SmB}_6$ ) down to  $16.7 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  ( $\text{Sm}_{0.95}\text{Eu}_{0.05}\text{B}_6$ ) in the regime of conductivity through intragap states ( $5 \text{ K} < T < 14 \text{ K}$ ). We suggest that the ‘small’ gap closes due to loss of the inherent coherence between intermediate valence  $\text{Sm}^{2.6+}$  state excitations under doping of magnetic Eu ions with stable  $^8\text{S}_{7/2}$  state of 4f-shell.

Financial support from Russian Science Foundation (Project No. 22-22-00990, <https://rscf.ru/project/22-22-00990/>) is acknowledged.

## References

1. M. Dzero et al., Phys. Rev. Lett., **104**, 106408, **2010**
2. N. Sluchanko et al., Phys. Rev. B, **61**, 9906, **2000**

## ВРЕМЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В МОДЕЛИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПОЛЯ

Анкудинов В. Е.

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

В работе предложено временное разложение в модели кристаллического фазового поля (КФП, phase-field crystal) [1, 2], позволяющее учитывать временную релаксацию, описываемую временными корреляционными функциями Ван-Хова. Модель КФП – континуальная атомистическая модель, основанная на описании свободной энергии в виде функционала поля атомной плотности, периодического в твердой фазе и однородного в жидкой. Учет структурных корреляций во времени и пространстве возможен в модели КФП посредством разложения обменного вклада функционала свободной энергии  $F_{ex}$ :

$$F_{ex}(n) = -\frac{1}{2} \int dr \int dr' n(r) C_2(|r-r'|) n(r'). \quad (1)$$

Рассмотрим разложение ур. (1) по малому изменению  $\Delta\rho(\mathbf{r}, t)$  по  $t$ , предполагая малые флуктуации во времени:

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}, t') = \Delta\rho(\mathbf{r}, t + \tau) - \Delta\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t + \tau) - \rho(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

тогда разложение второго порядка можно записать как:

$$\begin{aligned}
F_{ex}[\rho(\mathbf{r}, t)] = & F_{ex}[\rho_0] + \int dt \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) \frac{\delta F_{ex}[\rho_0]}{\delta \rho(\mathbf{r}, t)} + \int d\mathbf{r} \Delta\rho(\mathbf{r}, t) \frac{\delta F_{ex}[\rho(\mathbf{r}, t)]}{\delta \rho(\mathbf{r}, t)} \\
& + \int_0^{t'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Delta\rho(\mathbf{r}, t) \hat{\rho}(\mathbf{r}', t') \frac{\delta^2 F_{ex}[\rho(\mathbf{r}, t)]}{\delta \rho(\mathbf{r}, t) \delta \rho(\mathbf{r}', t')} \\
& + \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Delta\rho(\mathbf{r}, t) \Delta\rho(\mathbf{r}', t) \frac{\delta^2 F_{ex}[\rho(\mathbf{r}, t)]}{\delta \rho(\mathbf{r}, t) \delta \rho(\mathbf{r}', t)} \\
& + \frac{1}{2} \int_0^{t'} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' dt' \Delta\rho(\mathbf{r}, t) \Delta\rho(\mathbf{r}', t) \hat{\rho}(\mathbf{r}, t') \frac{\delta^3 F_{ex}[\rho(\mathbf{r}, t)]}{\delta \rho(\mathbf{r}, t) \delta \rho(\mathbf{r}', t) \delta \rho(\mathbf{r}, t')}. \quad (3)
\end{aligned}$$

Так как производная референтного  $F_{ex}(\rho_0)$  равна 0, отбрасываем этот член. Четвертый член в правой части включает в себя функцию, описывающую вероятность найти частицу в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t'$ , что имеет смысл корреляционной функции Ван-Хова [3, 4]. Последний член, включающий третью производную от  $F_{ex}$ , имеет смысл производной от функции Ван Хова [5]; в данном приближении отбросим его, пренебрегая флуктуациями второго порядка. Вблизи  $\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0$  полученное выражение для  $F_{ex}$  будет иметь вид:

$$\begin{aligned}
F_{ex}[\rho(\mathbf{r}, t)] = & F_{ex}[\rho_0] - k_B T \mu_{ex} \int d\mathbf{r} \Delta\rho(\mathbf{r}, t) \\
& - k_B T \int_0^{t'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Delta\rho(\mathbf{r}, t) G(\mathbf{r}, t') \hat{\rho}(\mathbf{r}', t') \\
& - \frac{k_B T}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Delta\rho(\mathbf{r}, t) C^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta\rho(\mathbf{r}', t) \quad (4)
\end{aligned}$$

Здесь  $\mu_{ex}$  – химический потенциал,  $G(\mathbf{r}, t')$  – корреляционная функция Ван Хова,  $C^{(2)}$  – парная корреляционная функция [3]. Рассматривая безразмерный параметр порядка  $n(\mathbf{r}, t)$ , обозначим его как  $n(t)$  для учета зависимости от времени и запишем отклонение свободной энергии  $\Delta F[n] = F[\rho] - F[\rho_0]$  по аналогии с моделью КФП [1]:

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta F[n]}{k_B T \rho_0} = & \int \left[ \frac{1-\varepsilon}{2} n^2 - \frac{a}{3} n^3 + \frac{v}{4} n^4 + n \frac{-C_0 + C_2 \nabla^2 - C_4 \nabla^4}{2} n \right. \\
& \left. - \int d\mathbf{r} \int_0^{t'} n G(\mathbf{r}, t') n(t') dt' \right] d\mathbf{r} \quad (5)
\end{aligned}$$

Данное уравнение содержит поправку, учитывающую временные корреляции в системе в виде функции Ван-Хова. В пределе  $t \rightarrow \infty$  эта поправка даст вклад в кубический член разложения Ландау, управляя метастабильностью в системе с фазовым переходом 1-го рода.

В работе выполнен ряд численных расчетов с использованием динамических уравнений, полученных минимизацией функционала свободной энергии ур. (5). При этом использовались аналитические аппроксимации функции Ван-Хова для броуновских частиц [4].

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 21-73-00263, <https://rscf.ru/project/21-73-00263/>.

#### Литература

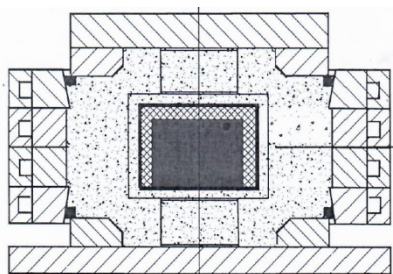
1. N. Provatas, K. Elder, Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering, 312 с., **2010**
2. V. Ankudinov et al. Phase Field Crystals: Fast Interface Dynamics, 135 с., **2018**
3. J.P. Hansen, I.R. McDonald, Theory of Simple Liquids 416 с., **2006**.
4. Hopkins P. et al. The van Hove distribution function for Brownian hard spheres: Dynamical test particle theory and computer simulations for bulk dynamics // J. Chem. Phys., Vol. 133, № 22. P. 224505, **2010**.
5. Gubbins K.E., Gray C.G., Egelstaff P.A. Thermodynamic derivatives of correlation functions // Mol. Phys., Vol. 35, № 2. P. 315–328, **1978**.

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДАВЛЕНИЯ ПЕСКА В АППАРАТЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

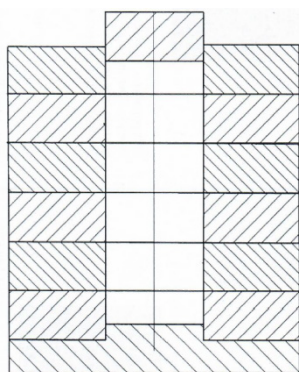
Антанович А.А.

*ФГБУН Институт физики высоких давлений имени Л.Ф. Верещагина  
Российской академии наук, Москва, Россия  
antanov@hppi.troitsk.ru*

Один из вариантов изостатической технологии получения углерод-углеродных композиционных материалов основан на использовании аппарата высокого давления (АВД) типа «цилиндр-поршень», в котором цилиндр набран из отдельных колец, средой, передающей давление, является кварцевый песок, а усилие на поршни создается с помощью гидравлического пресса. При этом режим давления песка в АВД задают величинами отношений усилия пресса к площади поршня аппарата, т.е. величинами давления на плоскости приложения усилия. Распределение давления песка внутри АВД остается при этом неизвестным. Это распределение зависит от внутреннего трения частиц песка между собой и внешнего трения частиц о стенки АВД и может существенно изменяться для различных партий песка, отличающихся размерами и формами частиц.

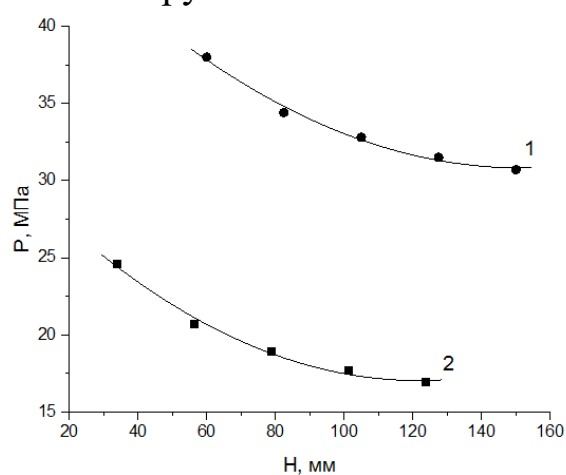
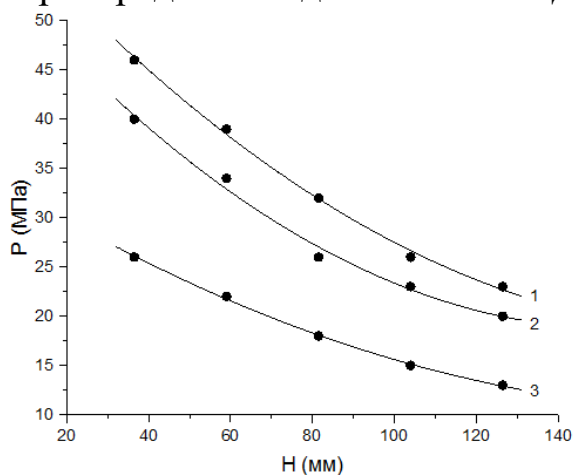


В виду сложности и недостаточной определенности теоретических расчетов и математического моделирования распределения давления в сыпучих веществах при осевой нагрузке мы приступили к экспериментальному изучению этих вопросов. Первоначально были экспериментально определены значения осевого давления на дно АВД и бокового давления на стенки аппарата в зависимости от расстояния от плоскости приложения осевой нагрузки. Эксперименты проводили на подобном АВД с цилиндром,



набираемым из нескольких колец (до шести). Изменяя количество колец цилиндра, мы выбираем расстояние от плоскости приложения давления до датчиков давления. Для определения давления использовалась заранее определенная зависимость степени пластической деформации таблетки алюминия от приложенного усилия.

В качестве датчика давления использовалась миниатюрная пресс-форма диаметром 10 мм и высотой 8 мм. Для измерения осевого давления на дно АВД устанавливались три датчика давления: по оси цилиндра, на среднем радиусе и около внутренней поверхности кольца. Для измерения бокового давления матрица пресс-формы выбиралась в теле силового кольца. На приведенных ниже рисунках показаны результаты распределения давления в АВД при осевой нагрузке 50 МПа.



На левом рисунке – зависимость осевого давления на дне АВД от расстояния до поршня: (1- в центре, 2 - на половине внутреннего радиуса, 3 - у боковой стенки): на правом рисунке - зависимость осевого и бокового давления от расстояния до плоскости приложения внешнего давления (1 - осевое давление  $P_0$ , 2 - боковое давление  $P_б$ ).

Одной из наиболее часто употребляемых в статике сыпучих веществ характеристик является коэффициент бокового давления  $\xi$  равный отношению бокового и осевого давлений  $P_{\phi}/P_o$ . Значения коэффициентов бокового давления использованного песка, вычисленные по результатам проведенных экспериментов, представлены в Таблице.

H, мм	60	80	100	120
$\xi$	0.53	0.54	0.54	0.54

Из приведенной таблицы следует, что найденный в нашем случае коэффициент бокового давления песка  $\xi = 0.54$  при внешней нагрузке является постоянной величиной, не зависящей от высоты слоя засыпки.

## ЛИНЕЙНОСТЬ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ СТАНДАРТНОЙ ЭНЕРГИИ ГИББСА У ИЗОМОРФНЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

Антонов В. Е., Музалевский В. Д., Орлов Н. С.  
*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*  
*antonov@issp.ac.ru*

Для превращений между фазами с различным содержанием водорода, происходящих при невысоких давлениях  $P$ , когда водород можно считать идеальным газом, в большом числе систем металл-водород в широких интервалах температур  $T$  наблюдается линейная зависимость  $\ln P(1/T)$ . Формально, такая зависимость могла бы наблюдаться для превращения  $Me + (z/2)H_2 = MeH_z$ , где  $z = \text{const}$ , если бы стандартные (отнесенные к  $P_0 = 1$  атм) энтальпия  $\Delta H^0$  и энтропия  $\Delta S^0$  этого превращения не зависели от температуры, поскольку в таком случае

$$\begin{aligned} \ln(P/P_0) &= 2/(zRT) \{G_{MeH_z}^0 - G_{Me}^0 - G_{H_2}^0\} = 2/(zRT) \Delta G^0 = \\ &= 2/(zR) \{\Delta H^0 / T - \Delta S^0\}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \cdot \Delta S^0$  – стандартная энергия Гиббса превращения, линейно зависящая от температуры.

На протяжении многих десятилетий в литературе дебатировалась не находившая решения проблема – почему линейная зависимость

In  $P(1/T)$  наблюдается в системе Pd-H, где образование гидрида происходит путем изоморфного перехода между фазами переменного состава – обедненной водородом (первичный твердый раствор) и обогащенной водородом (гидрид). Составы этих фаз сближаются при повышении температуры, пока не совпадут в критической точке, что можно изобразить в виде купола расслоения твердых растворов Pd-H на  $T-x$  проекции фазовой диаграммы. Наиболее детально проблема была рассмотрена в работе [1], авторы которой пришли к выводу, что эффект обусловлен случайным совпадением некоторых параметров системы Pd-H, но не установили, какие это параметры.

Вместе с тем, линейные зависимости  $\Delta G^0(T)$  наблюдались также для изоморфных превращений с переменными составами фаз в еще двух системах, Nb-H [2] и Ni-H [3]. Это уже закономерность, которую нельзя списать на случайные совпадения. Общей особенностью всех трех систем была симметричность купола расслоения твердых растворов Me-H относительно критической концентрации  $x_{cr} = z/2$ , где  $z$  – атомное отношение H/Me для гидридной фазы в равновесии с первичным твердым раствором при  $T \rightarrow 0$  К.

Нынешний доклад состоит из двух частей. В первой части показано, что купол расслоения будет симметричен, а давление изоморфного превращения будет описываться формулой (1), в которой  $G_{MeH_z}^0$  – это стандартная энергия Гиббса гидрида с фиксированным значением  $z$ , отвечающим  $T = 0$  К, если энергия Гиббса твердых растворов Me-H может быть записана в форме

$$G = c \cdot G_{Me}(T,P) + (1-c) \cdot G_{MeH_z}(T,P) + \Delta G_{mix}(c,T),$$

где  $\Delta G_{mix}(c,T)$  – энергия смешения, симметричная относительно замены  $c \rightarrow 1 - c$ , а концентрация  $c = (H/Me)/z$ . Таким образом, температурная зависимость давления изоморфного превращения будет определяться только температурными зависимостями термодинамических свойств чистого металла и его гидрида фиксированного состава  $MeH_z$  при фиксированном давлении  $P_0$ . В качестве  $P_0$  удобно выбрать давление 1 бар  $\approx$  1 атм, которое используется как стандартное в большинстве справочников и других работ.

Во второй части доклада, исходя из литературных данных по термодинамическим свойствам металла и гидрида фиксированного состава, для систем Pd-H и Pd-D ( $z = 0.63$ ) и систем Ni-H и Ni-D ( $z = 1$ ), показано, что изменения  $\Delta H^0$  и  $\Delta S^0$  с температурой приводят лишь



к слабому отклонению зависимости  $\Delta G^0(T)$  от линейности. В значительной степени это связано с тем, что изменения  $\Delta H^0$  и  $\Delta S^0$  в большей части экспериментально изученных температурных интервалов имеют одинаковый знак, и их вклады в  $\Delta G^0$  частично компенсируют друг друга, поскольку  $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \cdot \Delta S^0$ .

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 20-02-00638.

### Литература

1. T. B. Flanagan, J. F. Lynch, J. Phys. Chem., **79**, 444, **1975**
2. J. A. Pryde, C. G. Titcomb, Trans. Faraday Soc., **65**, 2758, **1969**
3. V. E. Antonov, A. S. Ivanov et al., J. Alloys Compd., **580**, S109, **2013**

## РАЗРАБОТКА СПОСОБА МОДИФИКАЦИИ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА СВС МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ TiNi

Артюхова Н.В., Аникеев С.Г., Кафтаранова М. И., Ходоренко В.Н.  
*Национальный исследовательский Томский государственный  
университет*  
*artyukhova\_nad@mail.ru*

Пористые СВС материалы на основе TiNi активно используется для создания имплантируемых устройств, используемых в онкологии, травматологии, челюстно-лицевой хирургии и др [1]. Известно, что процесс взаимодействия организма с пористым имплантатом определяется морфо-химическими параметрами поверхности его порового пространства [1]. На начальном этапе необходимо минимизировать воспалительно-репаративную реакцию за счет модификации состояния поверхности стенок пор СВС-сплава TiNi, чтобы ускорить процесс интеграции в паре «имплантат-ткань». Формирование развитой морфологии поверхности стенок пор существенно повышает адгезивные свойства материала.

В зависимости от начальных температурных условий СВС синтеза после прохождения волны горения возможно получение материала с различной пористостью, долей включений частиц вторичных фаз и толщиной оксикарбонитридного слоя на его поверхности [2]. Способ модификации порового пространства таких

материалов возможен воздействием на поверхность образца жидким раствором кислот с целью вытравливания слоя оксикарбонитридов и частиц вторичных фаз. Выбор данного способа связан с ограниченным воздействием на поверхность материала модификационных методов из-за его пористой структуры.

Предмет исследования работы – сплавы на основе никелида титана, полученные методом СВС при температурах синтеза 400 °С и 600 °С. Структурные особенности порового пространства пористых образцов исследованы методом SEM, химический состав – EDX. Для проведения модификации поверхности образцов использовался водный раствор кислот: плавиковой, азотной, соляной.

В ходе работы показано, что пористый сплав никелида титана, полученный при температуре начала синтеза 400 °С характеризуется как мелкопористый (МП), а при 600 °С – крупнопористый (КП), каждый из которых обладает однородной макроструктурой порового пространства и шероховатой микропористой поверхностью стенок пор. Установлено, что на поверхности порового пространства в МП СВС-материале количество вторичных фаз максимально, что обусловлено концентрационной неоднородностью расплава и тепловой неоднородностью фронта реакции при синтезе. При этом данный материал имеет средний размер пор 150 мкм с минимальным интервалом распределения пор по размерам. Крупнопористый сплав содержит меньшее количество вторичных фаз, за счет более полных процессов сплавообразования. На периферийной части поровой поверхности обоих образцов обнаружен слой сложного оксикарбонитридного состава, под ним располагается дендритные структуры, которые вносят характерный рельеф на поверхности стенок пор. Дендритные ячейки имеют некоторое расстояние между собой, достаточное для создания микропористой структуры.

Установлено влияние травления водным раствором кислот СВС-сплавов (КП и МП) на поровое пространство и возможность создание микропористой поверхности стенок пор. Показано, что химическая обработка СВС-материала разделяется на три этапа: удаление оксикарбонитридного слоя, междендритных прослоек с частицами вторичных фаз, слоя с зоной дендритной ликвации. После травления количество микропор в МП материале возрастает, что вносит значительный вклад в величину шероховатости поверхности стенок пор. Обработанный КП СВС-материал по сравнению с МП имел менее выраженную шероховатую микропористую поверхность за счет меньшего исходного числа вторичных фаз. Обнаружено, что

обработка травлением не приводит к значительному изменению пористости и среднего размера пор обоих образцов. Установлено, полученная после травления структура поверхности стенок пор обладает более высокими адгезивными свойствами для взаимодействия с клеточными культурами.

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

#### Литература

1. В. Э. Гюнтер, В. Н. Ходоренко, Ю. Ф. Ясенчук и др. «Никелид титана. Медицинский материал нового поколения». Томск: Изд-во «МИЦ», 2006.
2. S.G. Anikeev et.al, Mater. Res. Express. 6, 026570, 2019.

### ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ БОЗЕ-КОНДЕНСАТА В СИСТЕМЕ ДВУМЕРНЫХ КВАЗИЧАСТИЦ

Асриян Н.А.<sup>1</sup>, Елистратов А.А.<sup>1</sup>, Лозовик Ю.Е.<sup>2,3</sup>

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

<sup>2</sup>*Институт спектроскопии РАН, г. Троицк*

<sup>3</sup>*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», г. Москва  
norikas@yandex.ru*

Активно изучаемые в последние годы системы квазичастиц в двумерных материалах (экситоны, фотоны, экситонные поляритоны, магноны) открывают широкие возможности для получения и исследования бозе-конденсатов при высоких температурах. Однако, по причине конечного времени жизни квазичастиц, такие конденсаты проявляют особенности, нехарактерные для более изученных систем холодных атомов. Теоретическое описание особенностей этого состояния – предмет активных исследований последних лет [1-3].

Задачей данной работы является исследование особенностей образования бозе-конденсата в системе двумерных квазичастиц, связанных с их конечным временем жизни, в том числе при таком соотношении параметров системы, при котором марковское описание

без учёта эффектов памяти оказывается неудовлетворительным. С помощью диаграммной техники Келдыша для такой системы получены уравнения динамики в форме уравнений Ланжевена с памятью и предложена их модельная аппроксимация. Исследованы решения динамических уравнений и получена фазовая диаграмма для исследуемой системы квазичастиц. Проведён анализ стабильности решений и показано, что конечное время жизни частиц может приводить к перекрытию областей конденсата и нормальной фазы на фазовой диаграмме с образованием области бистабильности.

Продемонстрировано приложение модели к описанию конденсации экситонных поляритонов в квантовых ямах CdTe—HgTe—CdTe. В плоскости  $n$ - $T$ , где  $n$  – плотность системы,  $T$  – эффективная температура поляритонного газа, локализованы нормальная фаза и фаза конденсата, а также получены границы области их перекрытия.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 20-02-00410).

#### Литература

1. A.-W. de Leeuw, H. T. C. Stoof, and R. A. Duine, Phys. Rev. A **88**, 033829 (2013)
2. K. Dunnett and M. H. Szymańska Phys. Rev. B **93**, 195306 (2016)
3. A. A. Elistratov and Yu. E. Lozovik, Phys. Rev. B **97**, 014525 (2018)

## **СИНТЕЗ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ АЛМАЗОВ С ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫМИ ЦЕНТРАМИ**

Баграмов Р. Х.

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

В настоящее время известно большое число оптически-активных дефектов кристаллической решетки алмаза, которые, как правило, получают методом ионной имплантации. Большинство из них представляют собой комплексы внедренного атома с дефектом структуры (вакансия и/или атом углерода в междоузлии). Уникальный набор свойств люминесцентных алмазных частиц позволяет надеяться на широкое использование в био-визуализации, высокочувствительной метрологии в нано-диапазоне, во флуоресцентной маркировке и других областях.

Показано, что метод высоких давлений может быть использован для получения микро- и нано- алмазных частиц с оптическими центрами, например на основе азота, кремния, германия [1], [2]. Совершенствование данного подхода - актуальная задача.

Настоящая работа посвящена выявлению основных факторов, влияющих на размер, структуру, оптические и иные свойства алмазных частиц, получаемых методом высоких давлений.

Адамантан  $C_{10}H_{16}$ , молекула которого каркасная и напоминает алмазную решетку, был основным исходным веществом. Легирование кремнием проводили, добавляя tetrakis(trimethylsilyl)silane  $C_{12}H_{36}Si_5$ . Высокие давления создавали при помощи аппарата типа "тороид".

Показано, что изменением температуры, скорости нагрева, времени выдержки при параметрах синтеза, соотношения Si/C и H/C, можно влиять на степень выхода, размер алмазных частиц, их оптические свойства. В результате были получены микро-, субмикро- и нано- частицы с яркой SiV люминесценцией. Это показывает, что метод высоких давлений и температур позволяет эффективно управлять свойствами получаемых люминесцентных алмазов.

Выполнено в рамках программы Минобра FFUW-2021-0003.

#### Литература

1. V. A. Davydov, et. al, JETP Lett. **99**, 585, **2014**.
2. E. A. Ekimov, et. al, JETP Lett. **102**, 701, **2015**.

## **ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ ТЕМПЕРАТУРЫ НА РАЗМЫТИЕ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА**

Баева Э. М.

*Moscow State Pedagogical University*

*baeva.elm@gmail.com*

Сверхпроводящие флуктуации могут быть использованы как мощный инструмент для исследования микроскопических параметров сверхпроводников [1]. Сами по себе сверхпроводящие флуктуации – это случайные во времени изменения сверхпроводящего параметра порядка (модуля и фазы), происходящие в области конечного сопротивления образца. Результатом усреднения сверхпроводящих флуктуаций является конечное сопротивление образца на постоянном токе, отличное от своего значения в нормальном состоянии. За

пределами среднего значения физических величин, можно исследовать сами по себе их флуктуации, то есть характеризовать сопротивление как стационарный случайный процесс. При этом можно почерпнуть совсем новую информацию о динамике и механизме сверхпроводящих флуктуаций, недоступную при измерениях средней величины [2,3].

В этом докладе будут представлены результаты исследования размытия резистивного перехода в микромостиках эпитаксиальных пленок TiN. При измерениях на малых токах смещения мы обнаруживаем гигантский шум напряжения на резистивном переходе, который возникает из-за спонтанных равновесных флуктуаций сопротивления. Спектральная плотность шума, измеренная в полосе частот от 2МГц до 100МГц, имеет лоренцеву форму и соответствует единственному времени релаксации, попадающему в диапазон  $2\text{нс} < \tau_R < 30 \text{нс}$ . При этом значение  $\tau_R$  остается почти неизменным в области самой резкой температурной зависимости на резистивном переходе. При уменьшении критической температуры в магнитном поле  $\tau_R$  растет и демонстрирует зависимость от длины образца. Такое поведение позволяет идентифицировать  $\tau_R$  как время неупругой релаксации, определяемое электрон-фононным взаимодействием и диффузией электронов в контакты. Результаты можно количественно объяснить в терминах спонтанных флуктуаций температуры. На основе экспериментальных наблюдений, мы пришли к интересному заключению, что относительная флуктуация сопротивления внутри корреляционного объема не мала и близка к значению, когда сопротивление  $R$  скачет между значениями  $R=0$  и  $R=R_n$ , где  $R_n$  – сопротивление в нормальном состоянии. Последнее означает, что флуктуации температуры могут определять ширину резистивного перехода. Для описания влияния флуктуаций температуры на форму резистивного перехода мы предлагаем игрушечную модель и сравниваем ее с экспериментальными данными для высококачественных пленок TiN. Наши результаты демонстрируют существование нового механизма, участвующего в уширении резистивного перехода в умеренно чистых сверхпроводниках [2,3].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№17-72-30036) и РФФИ (№19-32-60076).

## Литература

1. A. A. Varlamov et al., Rev. Mod. Phys. 90, 015009, 2018

2. E. M. Baeva et al., arXiv: 2202.06309, 2022

3. E. M. Baeva et al., arXiv: 2202.06310, 2022

## ВЫЧИСЛЕНИЕ СВОЙСТВ СТЕКЛООБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМ ПРИ ПОМОЩИ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Балякин И.А.<sup>1,2</sup>, Рыльцев Р.Е.<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет

*i.a.balyakin@gmail.com*

Прогнозирование свойств стеклообразующих систем является актуальной научной задачей. Подходящим методом для решения этой задачи является атомистическое моделирование. Однако, медленная динамика, отсутствие дальнего порядка и, как следствие, невозможность описать систему элементарной ячейкой, сложный рельеф поверхности потенциальной энергии приводит к необходимости использования больших временных и пространственных масштабов при атомистическом моделировании стёкол. Это требование практически полностью исключает возможность использования при прогнозировании свойств стекол *ab initio* методов, например теории функционала плотности. Поэтому, перспективными при моделировании стеклообразующих систем выглядят классические методы моделирования с заранее заданным межатомным потенциалом взаимодействия. Потенциал определяющим образом влияет на прогнозируемые свойства, поэтому ключевым этапом при расчетах является его выбор.

С конца нулевых годов XXI века активно развивается подход к созданию межатомных потенциалов в виде искусственных нейронных сетей с использованием машинного обучения [1]. Такой подход позволяет на основе относительно небольшого набора *ab initio* данных получить классический потенциал способный достаточно хорошо воспроизводить *ab initio* поверхность потенциальной энергии.

В данной работе для модельной стеклообразующей системы SiO<sub>2</sub> в программном пакете DeePMD [2] был создан потенциал межатомного взаимодействия в виде набора искусственных нейронных сетей. Использование данного потенциала позволило увеличить производительность расчетов на 5 порядков в сравнении с расчетами методом теории функционала плотности. Сравнение сил и

энергий, полученных при использовании данного потенциала, с *ab initio* силами и энергиями, а также сравнение наблюдаемых структурных и кинетических свойств, позволяет сделать вывод, что данный потенциал обладает практически *ab initio* точностью. Помимо этого, было продемонстрировано, что обученный только на жидком SiO<sub>2</sub>, данный потенциал позволяет предсказывать наблюдаемые в эксперименте структурные свойства аморфного SiO<sub>2</sub>.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ (№-22-22-00506)

## Литература

1. J. Behler, M. Parinello, Phys. Rev. Lett., **98**, 14, **2007**
2. Wang *et al*, Comput. Phys. Commun., **228**, **2018**

## ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СПЛАВОВ Mg–Al ПРИ НОРМАЛЬНОМ ДАВЛЕНИИ

Баталова Е. А.<sup>1</sup>, Камаева Л. В.<sup>1,2</sup>, Щелкачев Н. М.<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,  
Россия, 426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

<sup>2</sup>Институт физики высоких давлений им. Верецагина РАН,  
Россия, 142190, Москва, Троицк, Калужское шоссе, стр. 14  
[elizaveta.smagina.97@mail.ru](mailto:elizaveta.smagina.97@mail.ru)

Известно, что для металлических систем совместный анализ структурно – чувствительных свойств (вязкости) и процессов кристаллизации (величины переохлаждения) позволяет качественно оценить, как изменяется межатомное взаимодействие в расплаве с изменением концентрации атомов [1-4]. В связи с тем, что сплавы системы Mg–Al, богатые магнием, малоизученны, возникает необходимость в проведении соответствующих исследований.

Поэтому в данной работе был проведен анализ концентрационных зависимостей вязкости и переохлаждения расплавов Mg–Al с содержанием магния от 50 до 95 ат.%, а также выполнено *ab initio* молекулярно-динамическое моделирование (AIMD) для получения данных о локальном химическом упорядочении.



Измерение кинематической вязкости ( $\nu$ ) расплавов Mg–Al проводили методом затухающих крутильных колебаний тигля с расплавом в варианте Швидковского [5] на автоматизированной установке [6]. В исследуемом интервале температур политермы вязкости в прямых и полулогарифмических координатах являются монотонными зависимостями. Незначительные отклонения политерм от экспоненциальной зависимости в области температуры плавления связаны с методикой эксперимента [7]. На концентрационных зависимостях вязкости расплавов Mg–Al, построенных по полученным температурным зависимостям, имеются 3 интервала с разным характером зависимости вязкости.

Переохлаждение ( $\Delta T$ ) расплавов Mg–Al исследовали методом дифференциального термического анализа на автоматизированной установке ВТА-983. На полученной в результате концентрационной зависимости  $\Delta T$  отмечается концентрация (80 ат.% Mg), при которой происходит значимое изменение переохлаждения, не связанное с типом образующихся кристаллов. Температурная зависимость величины переохлаждения этого сплава имеет немонотонный характер с особенностью при температуре 700 °С. Одна из особенностей на концентрационной зависимости вязкости также соответствует концентрации магния 80 ат.%.

AIMD [8, 9] сплава  $Al_{20}Mg_{80}$  при различных температурах показало, что уменьшение температуры приводит к ослаблению гетероатомного химического взаимодействия, что может приводить к эффектам при затвердевании.

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

## Литература

1. I. V. Sterkhova, L. V. Kamaeva., J. Non-Cryst. Solids, **401**, 250, **2014**
2. Л. В. Камаева, В. И. Ладьянов, Металлы, **2**, 41, **2012**
3. В. И. Ладьянов, И. В. Стерхова, Л. В. Камаева, В. С. Цепелев, ХФМ, **17** (№ 1), 105, **2015**
4. Е. А. Смагина, Л. В. Камаева, ХФМ, **21** (№ 1), 86, **2019**
5. E. G. Shvidkovskiy, NASA T T, **88**, **1962**
6. A. L. Bel'tyukov, V. I. Lad'yanov, Instrum. Exp., **51**, 304, **2008**
7. I. V. Sterkhova, L. V. Kamaeva, V. I. Ladyanov, Phys. Chem. Liq., **58** (№ 5), 559, **2020**

8. L. V. Kamaeva, R. E. Ryltsev, A. A. Suslov, N. M. Chtchelkatchev, J. Phys. Condens. Matter, **32**, 1, **2020**
9. L. V. Kamaeva, R. E. Ryltsev., V. I. Lad'yanov, N. M. Chtchelkatchev, J. Mol. Liq., **299**, 1, **2020**

## СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА, СПЕКТРОСКОПИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ, РТ-ДИАГРАММЫ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ БОРАТОВ БАРИЯ

Беккер Т. Б.<sup>1,2</sup>, Сагатов Н. Е.<sup>1,2</sup>, Подбородников И. В.<sup>1,2</sup>, Литасов К. Д.<sup>3</sup>  
<sup>1</sup>*Институт геологии и минералогии СО РАН*  
<sup>2</sup>*Новосибирский государственный университет*  
<sup>3</sup>*Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН*  
*t.b.bekker@gmail.com*

Барий считается наиболее распространенным катионом кислородных соединений бора [1]. В качестве объектов настоящих исследований выбраны соединения  $BaB_2O_4$  и  $BaB_4O_7$ . Модификации  $\alpha$ - и  $\beta$ - $BaB_2O_4$  являются важнейшими двулучепреломляющим и нелинейно-оптическим материалами УФ диапазона, соответственно [1];  $\alpha$ - $BaB_4O_7$  ( $P2_1/c$ ) представляет интерес для использования в твердотельной дозиметрии [2].

Известно четыре полиморфных модификации  $BaB_2O_4$ : высокотемпературная  $\alpha$ - $BaB_2O_4$  ( $R\bar{3}c$ ) [3], низкотемпературная  $\beta$ - $BaB_2O_4$  ( $R3c$ ) [4] (температура  $\alpha$ - $\beta$  фазового перехода 925 °С),  $\gamma$ - $BaB_2O_4$  ( $P2_1/n$ ) [5], стабильная при 300 К в диапазоне давлений 1.1-7.3 ГПа, и  $BaB_2O_4$ - $Pa\bar{3}$ , стабильная выше давления 7.3 ГПа. Полиморфная модификация  $BaB_2O_4$ - $Pa\bar{3}$ , изоструктурная  $CaB_2O_4$ - $Pa\bar{3}$ , открыта в результате численных исследований [6].

Согласно расчетам, высокобарическая модификация  $\beta$ - $BaB_4O_7$  ( $Pnam$ ) устойчива при 300 К при давлениях выше 1.9 ГПа.

С использованием многопуансонного гидравлического пресса «Discoverer-1500» DIA-типа при давлениях 3 ГПа, температурах 900 и 1000 °С, соответственно, получены кристаллы  $\gamma$ - $BaB_2O_4$  ( $P2_1/n$ ) [4] и  $\beta$ - $BaB_4O_7$  ( $Pnam$ ) [7] фаз, изучена их структура.

Уникальной особенностью структуры  $\gamma$ - $BaB_2O_4$  является присутствие реберно-связанных тетраэдров [ $B_2O_6$ ]. Число соединений

с реберно-связанными тетраэдрами весьма ограничено, впервые такое соединение было описано группой профессора Хуппертца в 2002 году,  $Du_4V_6O_{15}$  (синтезировано при 8 ГПа, 1000 °С) [8]. Фаза  $\gamma$ - $BaV_2O_4$  характеризуется наикратчайшим  $V \cdots V$  расстоянием 1.984 Å среди известных соединений с реберно-связанными тетраэдрами.

Рассчитаны РТ-диаграммы соединений  $BaV_2O_4$  и  $BaV_4O_7$ , экспериментальными и численными методами изучены спектры комбинационного рассеяния (КР). Наиболее интенсивная полоса на частоте  $853 \text{ см}^{-1}$  в спектрах КР  $\gamma$ - $BaV_2O_4$  соответствует симметричной деформационной моде кольца В-О-В-О в тетраэдрах с общим ребром, которую можно рассматривать как аналог «дышащей» моды. Наиболее интенсивные колебания на частотах  $481 \text{ см}^{-1}$  и  $416 \text{ см}^{-1}$  в спектрах КР  $\beta$ - $BaV_4O_7$  обусловлены деформационными колебаниями, локализованными, в основном, на атомах кислорода,  $O_4$  и  $O_2$ , соответственно, и «дыханием» тройных колец  $\langle 3\Box \rangle$ .

Установлено, что в ряду полиморфных модификаций  $\alpha \rightarrow \beta \rightarrow \gamma \rightarrow Pa\bar{3}$   $BaV_2O_4$  ширина запрещенной зоны монотонно увеличивается и составляет  $6.315 \rightarrow 6.468 \rightarrow 7.045 \rightarrow 7.340$  eВ. Тенденция к увеличению ширины запрещенной зоны при повышении давления установлена также для полиморфных модификаций  $BaV_4O_7$ : для  $\alpha$ - и  $\beta$ -модификаций ширина запрещенной зоны составляет 6.821 и 8.075 eВ, соответственно.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 21-19-00097.

### Литература

1. M. Mutailipu et al., Chem. Rev., **121**, 2021.
2. K. H. Gavhane et al., J. Alloys Compd., **817**, 2020.
3. A. D. Mighell et al., Acta Crystallogr., **20**, 1966.
4. K. Ito et al., Tokyo Inst. Tech., **15**, 1990.
5. T. B. Bekker et al., Inorg. Chem., **61**, 2022.
6. N. E. Sagatov et al., Comput. Mater. Sci., **199**, 2021.
7. T. B. Bekker et al., Cryst. Growth Des., **22**, 2022.
8. H. Huppertz, B. Eltz. J. Am. Chem. Soc., **124**, 32, 2002.

## ДВУМЕРНЫЕ ЭЛЕКТРОНЫ НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Бисти В.Е.

<sup>1</sup>ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия

*bisti@issp.ac.ru*

Двумерная электронная система в зависимости от параметра взаимодействия  $rs$  может рассматриваться как электронный газ, электронная Ферми-жидкость или вигнеровский кристалл. Гетеропереходы MgZnO/ZnO высокого качества, в которых  $rs$  может достигать 10, – удобный объект для изучения двумерных электронных систем с сильным кулоновским взаимодействием.

В гетеропереходе MgZnO/ZnO в перпендикулярном магнитном поле при наблюдении спектров люминесценции при рекомбинации электронов низкой плотности ( $rs \sim 6$ ) с фотовозбужденными дырками, связанными на удаленных акцепторах, отмечено необычное поведение уровней Ландау: веер уровней "инвертирован", что связывалось авторами с эффектом "экситона Махана" [1].

Двумерные электроны низкой плотности при определенных условиях могут образовывать квантовый вигнеровский кристалл. Квазидырки, возникающие при фотолюминесценции сильно взаимодействующих двумерных электронов, предложено рассматривать как квазичастицы в квантовом вигнеровском кристалле – вакансии. Закон дисперсии вакансионных рассматривается в приближении сильной связи для треугольной решетки. Интенсивность люминесценции без магнитного поля имеет максимум вблизи точки сингулярности [2].

Уровни Ландау вакансионных получены в квазиклассическом приближении. Обнаружена необычная зависимость энергии уровней Ландау от магнитного поля. Так, в антиферромагнитном случае для долины с центром в  $\Gamma$ -точке энергии уровней Ландау убывают с ростом поля, для двух К-долин - растут. Для ферромагнитного упорядочения ситуация обратная. Энергия, отвечающая точке сингулярности, не зависит от магнитного поля. Полученная зависимость энергии уровней Ландау объясняется существованием

ограниченной энергетической зоны и может говорить о возможности существования вигнеровского кристалла или вигнеровского стекла в ограниченном диапазоне  $rs$ .

Рассмотрено также возможное проявление в люминесценции особенности типа «экситон Махана» в магнитном поле. Без магнитного поля особенность типа «экситон Махана» - это пик интенсивности в поглощении и люминесценции на энергиях, близких к энергии Ферми, существующий при промежуточных плотностях частиц ( $rs \sim 2$ ) и исчезающий при больших плотностях ( $rs < 1$ ). Использовался метод, примененный ранее в работе [3] для 2D электронов без магнитного поля, в одноэкситонном приближении учитывалось статически экранированное кулоновское взаимодействие. Энергия магнитоэкситона, образованного электронами зоны проводимости и дырками валентной зоны с одинаковыми уровнями Ландау, расположена вблизи энергии Ферми и уменьшается с ростом магнитного поля. Однако, если сравнивать с экспериментом, этот уровень один и всегда не образует.

Аномальное поведение уровней Ландау в двумерных электронных системах очень низкой плотности скорее можно объяснить переходом в состояние вигнеровского кристалла, возможно, в виде отдельных доменов, без установления дальнего порядка во всем образце. К сожалению, недостаток экспериментальных данных не позволяет сделать однозначные выводы в пользу одной из моделей [4].

#### Литература

1. V.V. Solovyev and I.V. Kukushkin, Phys. Rev. **B 96**, 115131, **2017**
2. В.Е. Бисти, Письма в ЖЭТФ, **109**, 105, **2019**
3. S. Schmitt-Rink, C. Ell and H. Haug, Phys. Rev. **B 33**, 1183, **1986**
4. В.Е. Бисти, ФТТ, **64**, 1665 – 1671, 139-143, **2022**

## **CeV<sub>6</sub>: КОНДО-РЕШЕТКА ИЛИ СОЕДИНЕНИЕ С МАГНИТНЫМИ КЛАСТЕРАМИ. НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ**

Богач А.В.<sup>1</sup>, Болотина Н.Б.<sup>2</sup>, Хрыкина О.Н.<sup>2</sup>, Азаревич А.Н.<sup>1</sup>,  
Глушков В.В.<sup>1</sup>, Демишев С.В.<sup>1</sup>, Шицевалова Н.Ю.<sup>3</sup>, Половец С.<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>*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» им. А.В.Шубникова РАН,  
Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Институт проблем материаловедения им. И.Н.Францевича НАНУ,  
Киев, Украина  
alex@lt.gpi.ru*

Среди соединений с сильными электронными корреляциями одним из наиболее интересных и загадочных является гексаборид церия (CeV<sub>6</sub>). Принято считать, что этот сильно коррелированный металл с кубической кристаллической структурой представляет собой классический пример Кондо-решетки с малой температурой Кондо ( $T_K \approx 1-2$  К), сравнимой с температурами двух магнитных фазовых переходов, наблюдаемых в CeV<sub>6</sub> при  $T_Q \approx 3,2$  К (орбитальное упорядочение в антиферроквадрупольной (AFQ) фазе) и при температуре Нееля  $T_N \approx 2,3$  К (антиферромагнитное (АФ) состояние) [1]. Кроме того, в [1] было установлено, что при гелиевых температурах в AFQ состоянии CeV<sub>6</sub> наблюдается электронный нематический эффект, что свидетельствует о нарушении кубической симметрии в этом гексабориде. В подавляющем большинстве экспериментальных исследований и расчетов при описании CeV<sub>6</sub> используется одноионное приближение (см., например, обзор [2]), однако с учетом слабосвязанного состояния редкоземельных ионов в кубической структуре гексаборидов естественно ожидать случайных локальных смещений ионов Ce<sup>3+</sup> и образования магнитных кластеров церия наноразмера (димеров, тримеров и др.) в матрице RV<sub>6</sub> при низких температурах. Недавно при проведении магнитных измерений ряда твердых растворов замещения Ce<sub>x</sub>La<sub>1-x</sub>V<sub>6</sub> ( $0.01 \leq x \leq 1$ ) было показано [3], что в парамагнитном состоянии в интервале температур 10-200 К намагниченность в этих соединениях описывается степенной зависимостью вида

$$M(T) \sim A(T)T^{-0.8}, \quad (1)$$

отвечающей поведению разупорядоченных магнитных кластеров с АФ обменом (фаза Гриффитса). В [4-5] в родственной системе  $Gd_xLa_{1-x}B_6$  ( $0.01 \leq x \leq 1$ ) было обнаружено понижение симметрии, обусловленное развитием структурной неустойчивости борного каркаса (кооперативный динамический эффект Яна-Теллера) и приводящее к электронному фазовому расслоению.

В связи с этим, целью настоящей работы явилось проведение прецизионных структурных исследований  $CeB_6$  в интервале температур 80-500 К в сочетании с детальными широкодиапазонными (2-800 К) измерениями намагниченности в сильном магнитном поле различной ориентации и высокотемпературными измерениями транспортных характеристик (сопротивление и термоэдс). Показано, что в  $CeB_6$  для различных направлений внешнего магнитного поля при температурах 30-800 К наблюдается режим фазы Гриффитса для намагниченности, причем поведение коэффициента  $A(T)$  в соотношении (1) оказывается полностью скоррелированным с изменениями постоянной решетки  $a(T)$ , что свидетельствует об изменении с температурой характеристик магнитных кластеров ионов Ce. Анализ температурных кривых сопротивления и термоэдс также подтверждает выводы (i) о формировании магнитных кластеров и (ii) о возникновении выделенных направлений в кубической структуре, свидетельствуя в пользу общего для  $RB_6$  сценария развития структурной и электронной неустойчивости в этих сильно коррелированных металлах.

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

#### 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. A. P. Dudka *et al.*, Phys. Rev. B **100**, 205103, **2019**
5. E. S. Zhukova *et al.*, Phys. Rev. B **100**, 104302, **2019**

## **ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ РЕНОРМГРУППОВОЙ АНАЛИЗ ДВУХМЕРНОГО АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО КВАНТОВО-КРИТИЧЕСКОГО МЕТАЛЛА**

Борисов А. О.,<sup>1,2,3</sup> Боргес Ф.,<sup>2,3</sup> Синг А.,<sup>2,3</sup> Шлиф А.,<sup>2,3</sup> Ли С.С.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>*Московский Физико-Технический Институт*

<sup>2</sup>*Университет МакМастер, Гамильтон, Канада*

<sup>3</sup>*Периметр Институт, Ватерлоу, Канада*

*anton.borissov@gmail.com*

Металлическое состояние, возникающее в антиферромагнитной квантовой критической точке в двух пространственных измерениях, описывается теорией взаимодействующих полей. Это возможно, поскольку безщельные спиновые флуктуации связаны с электронами в горячих точках поверхности Ферми на всех энергетических масштабах. Тем не менее, эффективная теория поля при низких энергиях точно разрешима в том пределе, где локальные участки поверхности Ферми, связанные вектором магнитного упорядочения, близки к идеальному нестингу вблизи горячих точек.

В этой работе мы разрабатываем аналитическую функциональную ренормгруппу, позволяющую охватить универсальные свойства при низких энергиях всей поверхности Ферми. В нормальном состоянии вес квазичастиц, скорость Ферми и функции Ландау приобретают универсальную зависимость от импульсов в большом диапазоне энергии и импульсов. Ведущая сверхпроводящая неустойчивость возникает в d-волновом спин-синглетном канале, где температура перехода в сверхпроводимость и волновая функция спаривания также контролируются углом нестинга.

## **ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ ОГРАНИЧЕНИЕ НА МАКСИМАЛЬНУЮ СКОРОСТЬ ЖИВЫХ СУЩЕСТВ И МЕХАНИЗМОВ.**

Бражкин В.В.

*Институт физики высоких давлений РАН*

*brazhkin@hppi.troitsk.ru*

Рассматриваются максимальные скорости живых существ. Дается краткий обзор существующих подходов к биомеханике движения. Предлагается новый критерий для оценки максимально возможной



скорости перемещения, связанный с усталостной прочностью мышц и суставов. Полученные значения максимальной скорости – 40-50 м/с – прекрасно согласуются с реальными значениями. Интересно, что максимально возможные скорости практически не зависят от размеров существ и от среды их обитания (млекопитающие, птицы, рукокрылые, рыбы, насекомые). Этот же критерий можно использовать для оценки максимально возможной скорости механизмов с движущимися частями – вертолетов, автомобилей, роботов и т.п. Проводятся аналогии между фундаментальным ограничением на скорость передвижения и на скорость звука в конденсированных средах.

## **СТЕКольНЫЙ ПЕРЕХОД КАК ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В УПРУГОЙ СРЕДЕ**

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

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

<sup>2</sup>*Институт физики металлов УрО РАН*

<sup>3</sup>*Удмуртский ФИЦ УрО РАН*

*dr\_vasin@mail.ru*

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

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

В представленном докладе предложено развитие этого подхода. Показано, что в трёхмерной системе топологических дефектов может

происходить фазовый переход, описание которого сводится к простой модели с эффективным гамильтонианом

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

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

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

### Литература

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

## ПЛАВЛЕНИЕ И СТРУКТУРИЗАЦИЯ В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ ЧАСТИЦ С ГАУССОВЫМ ПИННИНГОМ

Гайдук Е. А., Рыжов В. Н., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.  
*Институт физики высоких давлений РАН им. Верецагина*  
*gaiduk.evgeniy@gmail.com*

Развитие техники сделало возможным практическое исследование двумерных и квазидвумерных систем. Эксперименты над системами коллоидных частиц и частиц мягкой материи [1–4] подтвердили существование различных сценариев плавления двумерных кристаллов [5–10].

Стоит отметить, что в условиях реального эксперимента, в отличие от большинства теоретических и компьютерных исследований, в системе вероятно присутствие тех или иных случайных факторов (дефектов подложки, примесей, неоднородностей полей и т.п.), взаимодействующих с основными частицами системы. Попытки теоретического описания влияния такого случайного беспорядка в двумерных системах предпринимались еще с момента становления теорий двумерного плавления [11, 12].

Со стороны компьютерного моделирования также получено много интересных результатов [13–17]. Важным обстоятельством в этих работах является выбор модели для случайных неоднородностей, взаимодействующих с частицами системы. Как правило, моделью беспорядка выступали дельта-ямы, в каждую из которых помещалось по одной частице. Частица, попавшая в такую яму, остается неподвижной, поэтому беспорядок такого типа часто называют пиннингом. Такая модель является неким предельным случаем. В действительности сила взаимодействия с беспорядком конечна, и пиннинг не является строгим. Кроме того, в область действия этой силы может вовлекаться несколько частиц.

Для описания взаимодействия такого пиннинга с частицами системы часто используют гауссов потенциал:

$$U(r) = -A \exp \left[ - \left( \frac{r}{\alpha} \right)^2 \right],$$

где  $A$  – глубина ямы, моделирующая силу взаимодействия,  $\alpha$  – параметр, задающий дальность взаимодействия.

В данной работе методом классической молекулярной динамики исследуется поведение системы мягких дисков в присутствии гауссового пиннинга. Показано, что различное сочетание глубины и ширины гауссовых ям приводит к принципиально различным результатам. Возможно наблюдение как классического варианта плавления двумерной системы, так и структуризации частиц в кластерах, порожденных пиннинг-центрами.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (проект №19-12-00092).

### Литература

1. F. Ebert, P. Dillmann, G. Maret, P. Keim, *Rev. Sci. Instrum.*, **80**, 083902, **2009**
2. A. L. Thorneywork, J. L. Abbott, D. G. A. L. Aarts, R. P. A. Dullens, *Phys. Rev. Lett.*, **118**, 158001, **2017**
3. E. V. Yakovlev, K. A. Komarov, K. I. Zaytsev, N. P. Kryuchkov, K. I. Koshelev, A. K. Zotov, D. A. Shelestov, V. L. Tolstoguzov, V. N. Kurlov, A. V. Ivlev, S. O. Yurchenko, *Sci. Rep.*, **7**, 13727, **2017**
4. F. Camerin, N. Gnan, J. Ruiz-Franco, A. Ninarello, L. Rovigatti, E. Zaccarelli, *Phys. Rev. X*, **10**, 031012, **2020**
5. В. Л. Березинский, *ЖЭТФ*, **59**, 907, **1970**
6. J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, *J. Phys. C*, **6**, 1181, **1973**
7. D. R. Nelson, B. I. Halperin, *Phys. Rev. B*, **19**, 2457, **1979**
8. A. P. Young, *Phys. Rev. B*, **19**, 1855, **1979**
9. В. Н. РЫЖОВ, *ЖЭТФ*, **100**, 1627, **1991**
10. E. P. Bernard, W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 155704, **2011**
11. D. R. Nelson, *Phys. Rev. B*, **27**, 2902, **1983**
12. M.-C Cha, H. A. Fertig, *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 4867, **1995**
13. E. N. Tsiok, D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, *Phys. Rev. E*, **92**, 032110, **2015**
14. E. A. Gaiduk, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, *Molecular Physics*, **117**, 29109, **2019**
15. E. N. Tsiok, Yu. D. Fomin, E. A. Gaiduk, V. N. Ryzhov, *Phys. Rev. E*, **103**, 062612, **2021**
16. S. Deutschlander, T. Horn, H. Lowen, G. Maret, P. Keim, *Phys. Rev. Lett.*, **111**, 098301, **2013**
17. W. Qi, M. Dijkstra, *Soft Matter*, **11**, 2852, **2015**

## ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СПЛАВЕ $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

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

Бинарный сплав  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  обладает ярко выраженной стеклообразующей способностью по сравнению с большинством других никельсодержащих сплавов [1]. Небольшое количество компонентов и возможность аморфизации в широком диапазоне температур, включая температуры, соответствующие нормальным условиям, делают сплав  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  идеальным кандидатом для изучения микроструктуры аморфного состояния.

Несмотря на достигнутые успехи в изучении структуры и физических свойств  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  до сих пор нет ясного понимания влияния давления на фазовые переходы в этом сплаве. Отсутствует подробная фазовая диаграмма, корректно отображающая линию фазового равновесия для широкого диапазона давлений. В настоящем исследовании с помощью моделирования молекулярной динамики мы определяем ( $p$ ,  $T$ ) фазовую диаграмму сплава  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ , которая охватывает диапазон температур от  $T=300$  К до  $T=6000$  К и давления до  $p=1.2 \cdot 10^7$  атм [2]. Обнаружено хорошее согласие между рассчитанными и экспериментальными значениями температуры ликвидуса и температуры стеклования при давлении 1 атм [3]. Фазовая диаграмма детализирована для давлений  $> 10^7$  атм и определены условия фазового разделения, при которых сосуществуют жидкая фаза Nb и перколяционная кристаллическая фаза Ni. Полученные результаты показывают, что давление является одним из основных термодинамических параметров, управляющих структурными и фазовые превращения в сплаве  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ .

Работа выполнена при поддержке РФФ проект №19-12-00022). АВМ выражает признательность Фонду развития теоретической физики и математики «Базис» (№ 20-1-2-38-1).

### Литература

1. J. Jeon et al., J. Mater. Research and Technology, **16**, 129, **2022**
2. B. N. Galimzyanov, M. A. Doronina, A. V. Mokshin, J. Non-Cryst. Solids, **572**, 121102, **2021**
3. N. A. Mauro, M. L. Johnson, J. C. Bendert, K. F. Kelton, J. Non-Cryst. Solids, **362**, 237, **2013**

# ДИНАМИКА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА В ЦИКЛИЧЕСКИХ (ДО 80 КЭ) И В ИМПУЛЬСНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ (ДО 500 КЭ)

Гамзатов А.Г.<sup>1</sup>, Алиев А.М.<sup>1</sup>, Каманцев А.П.<sup>2</sup>, Кошкидько Ю.С.<sup>2</sup>,  
Быков Э.О.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН,  
Махачкала, Россия*

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

<sup>3</sup>*Dresden High Magnetic Field Laboratory,  
Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Dresden, Germany  
gamzatov\_adler@mail.ru*

Технология магнитного охлаждения, основанная на магнитокалорическом эффекте (МКЭ), является одной из перспективных областей применений магнитных материалов, отвечающая требованиям энергоэффективности и экологии. Яркими представителями магнитокалорических материалов являются сплавы Гейслера Ni-Mn-Z (Z=In, Ga, Sn, Cu и т.д), в которых гигантские значения МКЭ наблюдаются благодаря магнитоструктурным фазовым переходам. Известно, что в охлаждающих устройствах на основе МКЭ материал рабочего тела будет подвергаться долговременному циклическому воздействию магнитного поля, поэтому нужно определять магнитокалорические свойства материалов не только в условиях квазистатического изменения магнитного поля, а в первую очередь в динамическом режиме, когда на магнитокалорический материал воздействует циклическое магнитное поле. Известно, что скорость развертки поля или частота циклического долговременно воздействующего магнитного поля влияет на магнитные и магнитокалорические свойства.

Данная работа посвящена исследованию магнитокалорических свойств сплава Ni<sub>47</sub>Mn<sub>40</sub>Sn<sub>12.5</sub>Cu<sub>0.5</sub> в циклических магнитных полях 18 и 80 кЭ. Также приводятся результаты прямых измерений МКЭ в импульсных магнитных полях до 500 кЭ.

На рис.1а приведены температурная зависимость МКЭ образца Ni<sub>47</sub>Mn<sub>40</sub>Sn<sub>12.5</sub>Cu<sub>0.5</sub> в магнитном поле 18 кЭ в режимах нагрева и охлаждения. Вблизи магнитоструктурного перехода наблюдается обратный МКЭ, сопровождающийся широким гистерезисом (~21 К). Величина обратного эффекта зависит от скорости нагрева или

охлаждения, чем выше скорость, тем больше величина обратного эффекта.

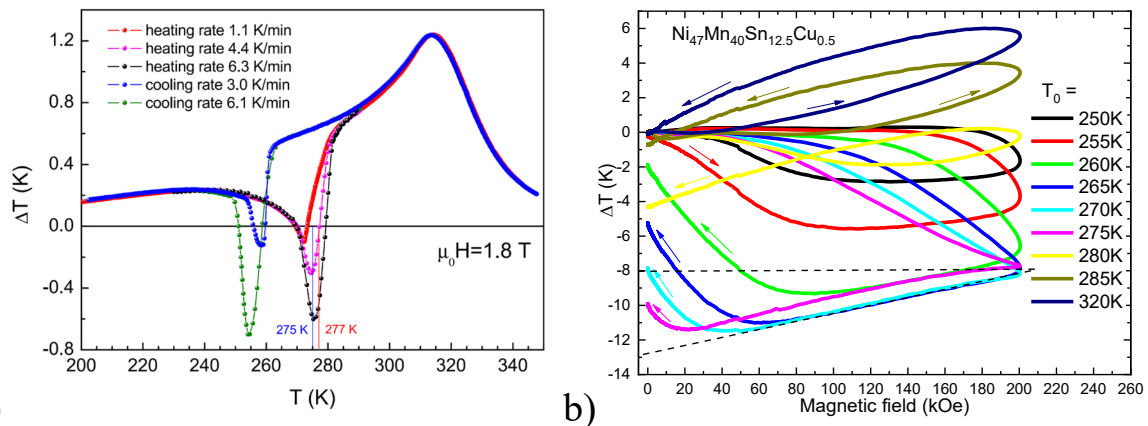


Рис.1. а) Температурная зависимость  $\Delta T$  в циклическом поле 18 кЭ. б) Полевая зависимость  $\Delta T$  в импульсных полях до 200 кЭ.

Максимальная величина обратного эффекта в циклическом поле 18 кЭ в режиме нагрева наблюдается при скорости нагрева 6.3 K/min и равна  $\Delta T = -0.6$  К. При таком измерении не измеряются эффекты первого включения, сигнал формируется на основе нескольких циклов. Поэтому, чем медленнее идет изменение температуры образца в области магнитоструктурного фазового перехода, тем больше циклов включения/выключения поля происходят, и соответственно, большая часть образца переходит в аустенитную фазу, и наблюдаемая величина обратного эффекта мала.

Прямые исследования МКЭ в сплаве Гейслера  $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{40}\text{Sn}_{12.5}\text{Cu}_{0.5}$  в сильных импульсных магнитных полях показали (рис.1b) наличие как обратного, так и прямого МКЭ в области температур 250-320 К. Анализ результатов показывает, что динамика МКЭ сильно зависит от термической подготовки и скорости введения магнитного поля. Величина и знак МКЭ в сплаве Гейслера  $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{40}\text{Sn}_{12.5}\text{Cu}_{0.5}$  в импульсных полях до 200 кЭ зависит от начальной температуры эксперимента. Так, при начальных температурах 250-280 К (область гистерезиса МСФП 1-го рода) МКЭ будет обратным, а максимальная его величина  $\Delta T = -8$  К при  $T_0 = 275$  К в поле 200 кЭ. МКЭ при данной температуре необратим – конечная температура образца опускается ниже начальной на 10 К.

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

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА НА ИНТЕГРАЛАХ ПО ТРАЕКТОРИЯМ ДЛЯ АМОРФНЫХ ЛЬДОВ

Гаркуль А. А.<sup>1,2</sup>, Кондратюк Н. Д.<sup>1,2,3</sup> и Стегайлов В. В.<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>*Объединённый институт высоких температур РАН*

<sup>2</sup>*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*

<sup>3</sup>*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»*

*garkul.aa@phystech.edu*

В отличие от кинетики обычных фазовых переходов первого рода, кинетика переходов между кристаллической и аморфной твердыми фазами и между двумя различными аморфными твердыми фазами изучена гораздо меньше. Для микроскопического понимания того, как проходят подобные превращения в кристаллических и аморфных льдах, эффективным теоретическим инструментом является компьютерное моделирование методом молекулярной динамики.

В настоящее время существует большое разнообразие молекулярно-динамических моделей воды разной степени сложности. Ранее [1] методом классической молекулярной динамики для модели TIP4P/Ice [2] нами были изучены температурные и барические зависимости упругих модулей наблюдаемые в эксперименте [3] и характер нуклеации при переходе LDA-HDA. Данная работа посвящена расчетам методом молекулярной динамики на интегралах по траекториям (path-integral molecular dynamics - PIMD) для модели q-TIP4P/F [4]. Данный подход позволяет учитывать квантовые эффекты, связанные с нулевыми колебаниями атомов. В частности, в докладе будут представлены радиальные функции распределения и модули упругости в зависимости от температуры и давления и их сравнение с экспериментальными данными [1, 5].

### Литература

1. A. Garkul, V. Stegailov. Molecular dynamics analysis of amorphous ice transformations: elastic properties and nucleation, 02 February 2022, PREPRINT (Version 1) available at Research Square [<https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-1300246/v1>]



2. Abascal J. L. F. et al. A potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice //The Journal of chemical physics. – 2005. – Т. 122. – №. 23. – С. 234511.
3. Gromnitskaya, E. L., Stal'gorova, O. V., Brazhkin, V. V., & Lyapin, A. G. Ultrasonic study of the nonequilibrium pressure-temperature diagram of H<sub>2</sub>O ice //Physical Review B. – 2001. – Т. 64. – №. 9. – С. 094205.
4. 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.
5. J. Finney, A. Hallbrucker, I. Kohl, A. Soper & D. Bowron, Structures of high and low density amorphous ice by neutron diffraction. Phys. Rev. Lett. 88, 225503 (2002).

## **О ВОЗМОЖНОСТИ ЗНАЧИТЕЛЬНОГО УВЕЛИЧЕНИЯ ВРЕМЕНИ ХРАНЕНИЯ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ В ЛОВУШКАХ, ПОКРЫТЫХ ПЛЕНКОЙ ЖИДКОГО ГЕЛИЯ**

Григорьев П. Д.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, 142432,*

*МО., г. Черноголовка, просп. Академика Семенова, д. 1А*

<sup>2</sup>*НИТУ «МИСиС», 119049, Москва, Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1*

*grigorev@itp.ac.ru*

Мы предлагаем метод увеличения времени хранения нейтрона и точности измерения его времени жизни как минимум в 10 раз [1,2]. Хранение ультрахолодных нейтронов (УХН) в материальных ловушках в настоящее время обеспечивает наиболее точные измерения времени жизни нейтронов и используется во многих других экспериментах. Точность этих измерений ограничена взаимодействием УХН со стенками ловушки. Мы показываем, что покрытие стенок ловушки жидким гелием может сильно уменьшить потери УХН из материальных ловушек. <sup>4</sup>Не вообще не поглощает нейтроны. Сверхтекучий гелий покрывает стенки ловушки тонкой пленкой толщиной  $\approx 10$  нм из-за ван-дер-ваальсова притяжения. Однако эта пленка Не на плоской стенке слишком тонкая, чтобы защитить УХН от их поглощения внутри материала ловушки. Комбинируя притяжение Ван-дер-Ваальса с капиллярными эффектами, мы показываем, что шероховатость поверхности может

увеличить толщину этой пленки намного больше глубины проникновения нейтронов,  $\approx 33$  нм. Использование жидкого He для хранения УХН требует низкой температуры,  $T < 0.5$  К, чтобы избежать взаимодействия нейтронов с паром He, а потери нейтронов из-за взаимодействия с поверхностными волнами малы и могут быть учтены используя их линейную температурную зависимость [3].

#### Литература

1. P.D. Grigoriev, A.M. Dyugaev, Phys. Rev. C 104, 055501, 2021
2. П.Д. Григорьев, А.М. Дюгаев, Т.И. Могилюк, А.Д. Григорьев, Письма в ЖЭТФ, 114, 560, 2021
3. P.D. Grigoriev, O. Zimmer, A.D. Grigoriev, T. Ziman, Phys. Rev. C 94, 025504, 2016; P.D. Grigoriev et al., to be published.

### **ТЕОРИЯ КОСВЕННЫХ ОБМЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ, ОПИСЫВАЮЩАЯ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МУЛЬТИСЛОЕВ ЖЕЛЕЗО-ХРОМ, ОБЛАДАЮЩИХ ЭФФЕКТОМ ГИГАНТСКОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ**

Гудин С.А.

*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия  
gudin@imp.uran.ru*

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

Интенсивное изучение электрических и магнитных свойств многослойных пленок Fe/Cr с нанометровой толщиной отдельных слоев Fe и Cr вызвало обнаружение в 1988 г. эффекта гигантского магнитосопротивления (GMR) позволившему поднять на новый уровень плотность записи информации в цифровой технике. Экспериментально было установлено, что эффект GMR наблюдался только в таких пленках Fe/Cr, в которых в отсутствие магнитного поля магнитные моменты соседних слоев железа  $M_{Fe}$  ориентированы антипараллельно (или почти антипараллельно, скошено). Обнаружение столь сильной зависимости GMR от магнитной структуры пленок Fe/Cr стимулировало детальное изучение, зависимости магнитных характеристик этих гетероструктур от

толщины ферромагнитных слоев, толщины антиферромагнитной прослойки, от шероховатости границ раздела, от перемешивания слоев. Было установлено, что в отсутствие внешнего магнитного поля при достаточно гладких границах раздела слоев магнитная структура многослойных пленок Fe/Cr меняет свой тип с ферромагнитного на антиферромагнитный (взаимная ориентация соседних магнитных моментов слоев железа меняется с сонаправленной на противоположно направленную) при изменении толщин прослойки хрома на один атомный слой, – короткий период осцилляций магнитной структуры. Другое периодическое изменение магнитной структуры при изменении толщины прослойки хрома связано с периодическим нарушением короткопериодических осцилляций – так называемый длинный период осцилляций магнитной структуры. Было обнаружено еще два нетривиальных свойства: существование неколлинеарных ориентаций намагниченности соседних слоев железа в отсутствие магнитного поля и необычное поведение начальной кривой намагничивания, которая может выходить за пределы петли гистерезиса.

Разработана теория, описавшая основные магнитные свойства в многослойных пленках железо/хром, обладающих эффектом гигантского магнитосопротивления [1-7]. Теория основывается на следующих предположениях: 1. слои железа ферромагнитны, а магнитная (антиферромагнитная) структура хрома имеет вид поперечной линейно поляризованной волны спиновой плотности (лВСП); 2. обменное взаимодействие железо-хром считается слабым возмущением по сравнению с обменными взаимодействиями внутри слоев железа и хрома, поэтому учитывались поправки первого и второго порядка теории возмущений; 3. относительная величина этих поправок зависит от степени шероховатости границ раздела Fe/Cr, считалось, что размер шероховатостей имеет нанометровый масштаб. Показано, что при таких приближениях взаимная ориентация намагниченностей слоев железа может быть параллельной, антипараллельной и неколлинеарной. Определены границы устойчивости этих структур в зависимости от толщины прослойки хрома и величины отношения поправок первого и второго порядка, построена фазовая диаграмма магнитных структур пленок Fe/Cr/Fe. Полученная фазовая диаграмма использовалась для расчета поведения фазы лВСП во внешнем магнитном поле. Вычислены условия потери устойчивости, при которых фаза лВСП меняется скачком в магнитном поле.

Теория позволила объяснить экспериментально обнаруженные магнитные аномалии в таких пленках: (1) существование двух периодов осцилляций на зависимости магнитных свойств пленок от толщины прослойки хрома, (2) формирование неколлинеарных ориентаций намагниченностей соседних слоев железа, (3) выход кривой начального намагничивания за пределы петли гистерезиса перемагничивания.

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

### Литература

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

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ВЕРТИКАЛЬНЫХ СТРУН КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ ПОЛЯХ**

Гурский К.Д., Юрченко С.О., Крючков Н.П.

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

В последние годы активно изучаются двумерные коллоидные системы с управляемыми взаимодействиями, индуцированными внешними вращающимися магнитными или электрическими полями [1-4]. Коллоидные частицы в таких системах, как правило, формируют монослой на подложке под действием сил тяжести. Однако, если внешнее вращающееся электрическое или магнитное поле имеет ненулевую компоненту ортогональную к подложке, то соответствующие индуцированные межчастичные силы взаимодействия, имеющие диполь-дипольную природу, могут разрушить монослой и формировать вертикальные струны из частиц. В частности, данное явление наблюдается в случае конически

вращающихся магнитных полей, если угол раствора конуса мал. Однако, указанное явление слабо изучено.

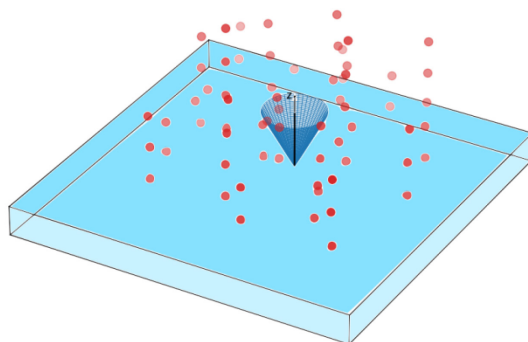


Рис.1 Визуализация формирующихся вертикальных струн частиц (красные точки), находящихся на подложке во внешнем вращающемся коническом магнитном поле.

В настоящей работе проводится систематическое изучение формирования вертикальных струн коллоидных частиц, находящихся во внешних вращающихся магнитных конических полях, методом компьютерного моделирования. В рамках работы динамика каждой частицы описывается при помощи передемпфированного уравнения Ланжевена. Взаимодействие частиц складывается из двух компонент. Контактные отталкивающие взаимодействия частиц, были аппроксимированы при помощи потенциала Вика-Чендлера-Андерсона. Силы индуцированного взаимодействия на каждом шаге моделирования рассчитывались в несколько этапов: (1) годограф вращения магнитного поля аппроксимируется набором из 32-ух векторов; (2) для каждого из этих векторов внешнего поля выполняется расчет самосогласованных значений магнитных диполей частиц, при заданном значении поляризуемости частиц; (3) для полученных дипольных моментов выполняется расчет сил диполь-дипольного взаимодействия между частицами; (4) выполняется усреднение полученных индуцированных сил по всем 32-ум направлениям. Кроме того, учитывалось влияние сил тяжести на частицы и сил взаимодействия частиц с подложкой, которые аппроксимировались при помощи потенциала Вика-Чендлера-Андерсона. Пример формирующихся вертикальных струн изображен на Рис.1. В результате моделирования рассчитаны фазовые диаграммы областей формирования вертикальных струн частиц при разных конических годографах внешнего управляющего магнитного

поля, вычислены статистические характеристики распределений размеров формирующихся струн при различных параметрах системы.

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

#### Литература

1. Yakovlev E.V. et.al., Scientific Reports, 7, 13727, **2017**
2. Komarov K.A. et.al. Soft Matter, 16, 8155, **2020**
3. Azari, A. et.al. Langmuir, 33, 13834, **2020**
4. Yakovlev E.V. et.al., Journal of Colloid and Interface Science, 608, 564 **2022**

## СПИН-ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МАГНЕТИКАХ

Демишев С.В.

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

Под спин-флуктуационным переходом (СФП) понимается изменение характеристик спиновых флуктуаций под воздействием управляющих параметров (например, температуры или состава материала), не связанное с образованием фаз с дальним магнитным порядком [1]. Для стандартной теории фазовых превращений характерно рассмотрение флуктуаций как некоторого сопутствующего магнитному переходу явления. Исключениями из этого «правила» могут служить спин-флуктуационная теория Мории [2] или сценарий Бразовского [3,4]. Однако, и в этих случаях, спин-флуктуационная проблематика полностью включена в парадигму классических магнитных фазовых переходов. Современное состояние проблемы позволяет выделить несколько типов СФП, которые были исследованы теоретически и (или) экспериментально.

*СФП беспорядок – беспорядок.* Переходы такого типа отражают изменение характера магнитных флуктуаций в парамагнитной фазе спиральных магнетиков  $MnSi$  и  $Mn_{1-x}Fe_xSi$  и могут быть диагностированы по изменению намагниченности и магнитной восприимчивости, а также картины нейтронного рассеяния [5-7] и, поэтому, часто описываются как фазы с промежуточным магнитным порядком (магнитный аналог жидкой или аморфной фазы). С

теоретической точки зрения для описания СФП у  $MnSi$  и  $Mn_{1-x}Fe_xSi$  необходимо учитывать сосуществование классических и квантовых флуктуаций [6].

Исследование неупорядоченной модели Изинга показало возникновение СФП, заключающегося в резком изменении амплитуды спиновых флуктуаций и функции распределения обменной энергии при изменении концентрации случайно расположенных в пространстве магнитных центров [8]. Интересно, что СФП этого типа возникает как для ферромагнитного, так и для антиферромагнитного обмена и не может быть описан в рамках теории Ландау [8].

*СФП беспорядок – скрытый (квадрупольный) порядок.* Это магнитный переход в фазу спинового нематика, при котором изменяется анизотропия спиновых флуктуаций [9]. В парамагнитной фазе средний спин на узле равен нулю, а спиновые флуктуации (средний квадрат спина) одинаковы по всем направлениям. При переходе в фазу с квадратупольным порядком средний спин по-прежнему равен нулю, а средний квадрат спина будет разным вдоль разных направлений. Эффект спинового нематика был обнаружен в антиферроквадрупольной фазе  $CeV_6$  [10,11] методом исследования угловых зависимостей ЭПР и магнитосопротивления.

*Ориентационный СФП* заключается в изменении выделенного направления анизотропных спиновых флуктуаций и экспериментально наблюдался в антиферроквадрупольной фазе  $CeV_6$  при варьировании температуры [11].

*СФП порядок – порядок.* Исследование ЭПР позволило обнаружить спин-флуктуационный переход при  $T \sim 15$  К в магнитоупорядоченной (спин-поляризованной фазе)  $MnSi$ , обусловленный квантовыми флуктуациями [12]. Примечательно, что этот СФП происходит при температуре существенно меньшей температуры перехода в магнитоупорядоченную фазу ( $\sim 30$  К) и находится вне пределов классической флуктуационной области.

В заключение отметим, что в настоящее время СФП изучены недостаточно подробно и дальнейшие исследования в этом направлении могут оказаться одной из точек роста в современной физике магнитных явлений.

## Литература

1. S.V. Demishev, Applied Magnetic Resonance, **51**, 473, 2020

2. T. Moriya, *Spin fluctuations in itinerant electron magnetism*, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, Springer-Verlag, **1985**
3. С.А. Бразовский, *ЖЭТФ*, **68**, 175, **1975**
4. M. Janoschek, et al. *Phys. Rev. B* **87**, 134407, **2013**
5. S.V. Grigoriev, et al. *Phys. Rev. B* **83**, 224411, **2011**
6. S.V. Demishev, et al. *Pis'ma v ZhETF*, **98** (12), 933, **2013**
7. S.V. Demishev, et al. *Pis'ma v ZhETF*, **103** (5) 365, **2016**
8. Н.А. Богословский, и др. *Письма в ЖЭТФ*, **114** (6), 383, **2021**
9. K. Penc, A.M. Läuchli, in *Introduction to Frustrated Magnetism*, Springer Series in Solid-State Sciences, vol. 164, **2011**
10. A.V. Semeno, et al. *Sci. Rep.* **6**, 39196, **2016**
11. S.V. Demishev, et al. *Sci. Rep.* **7**, 17430, **2017**
12. С.В. Демишев, и др. *Письма в ЖЭТФ*, 115, 717, **2022**

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ САХАРОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Дещеня В. И.<sup>1,2</sup>, Кондратюк Н. Д.<sup>1,2,3</sup>, Ланкин А. В.<sup>1,2</sup>, Норман Г. Э.<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>*МФТИ (НИУ)*

<sup>2</sup>*ОИВТ РАН*

<sup>3</sup>*НИУ ВШЭ*

*deshchenia.vi@phystech.edu*

Сахара широко распространены в природе. Кроме того, мембраны на основе полисахаридов применяются и в технике для различных задач. Они используются при опреснении морской воды, а так же её очистке от примесей. Кроме того, они могут быть использованы как разделительные мембраны в электрохимических источниках тока. Исследование сахаров также необходимо для понимания многих процессов в почве, что важно для сельскохозяйственной отрасли.

При этом, для многих задач необходима возможность изучения сахаров и их растворов на молекулярном уровне, с чем может помочь метод молекулярной динамики. Однако, этот метод требует подходящего силового поля, корректно воспроизводящего взаимодействия между молекулами в системе. В литературе же до сих пор не представлено универсального потенциала, который хорошо воспроизводит транспортные свойства для высококонцентрированных водных растворов сахаров. Поэтому имеет смысл исследовать новые силовые поля, которые разрабатываются для жидкостей.



Основной целью данной работы является подбор потенциала, корректно воспроизводящего взаимодействия в водных растворах сахаров на примере растворов сахарозы, а так же их характеристики и свойства, такие как плотность, транспортные коэффициенты, структура раствора. Подходящим кандидатом является модификация силового поля OPLS-AA с коррекцией зарядов, уточняющая взаимодействие в конденсированных системах [1]. В работе рассматривается молекулярно-динамическая модель водного раствора сахарозы, основанная на данном потенциале и модели воды TIP4P/2005. Исследуется воспроизводимость ею структурных, статических и динамических характеристик растворов при разных концентрациях сахара от 10% до 50% в температурном диапазоне от 273 К до 343 К. Используемая модель предсказывает все четыре конформации сахарозы в растворе, показанные ранее в работе [2]. Для рассматриваемой модели доля конформации  $M_2$  ниже, чем для силового поля GLYCAM06, что лучше согласуется с экспериментом согласно [2]. Конформация  $M_3$  наблюдается только в диапазоне температур от 283 К до 308 К. Получено согласие температурных зависимостей плотности раствора с экспериментальными данными [3]. Отклонение составляет не более 1%. Полученные коэффициенты диффузии и вязкости также находятся в согласии с экспериментальными данными. Относительное расхождение наблюдается при низких температурах и высоких концентрациях. Гидродинамический радиус молекулы сахарозы, выражающийся из формулы Стокса-Эйнштейна, не зависит от температуры. Его уменьшение при росте концентрации сахара качественно воспроизводит экспериментальную зависимость, построенную из данных по диффузии [4] и вязкости [5]. Это может быть следствием изменения граничных условий обтекания молекулы сахара в растворе.

Подводя итог, силовое OPLS-AA с коррекцией парциальных зарядов 1.14\*CM1A на атомах в комбинации с моделью воды TIP4P/2005 достаточно аккуратно воспроизводит конформацию молекулы сахарозы в водных растворах, а также температурные зависимости плотности, вязкости и диффузии при концентрации сахара от 10 % до 50 %. Данная работа дает основания считать, что OPLS-AA/1.14\*CM1A можно использовать и для других сахаров, что представляет интерес для широкого круга задач.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 18-19-00734).

## Литература

1. L. S. Dodda et. al., J. Phys. Chem. B, **121(15)**, 3864, **2017**
2. J. Xia, D. A. Case, Biopolymers, **97(5)**, 276, **2012**
3. H. Wagenbreth et. al., PTB-Mitt., **98(2)**, 198, **1988**
4. M. Rampp et. al., Carbohydr. Res., **328(4)**, 561, **2000**
5. V. R. N. Telis et. al., Int. J. Food Prop., **10(1)**, 185, **2007**

## **СПИНОВАЯ ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА, СОЗДАННАЯ НА ОСНОВЕ РАБОТЫ ВАКСА, ЛАРКИНА, ПИКИНА, В ЗАДАЧАХ АНАЛОГОВОГО КВАНТОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Елистратов А.А.

*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматки,  
Росатом  
andrei.a.elistratov@mail.ru*

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

Серьезной проблемой при теоретическом изучении спиновых систем является неабелев характер спиновых операторов, по причине которого их коммутатор равен не  $s$ -числу, как у фермионов и бозонов, а снова спиновому оператору. Это обстоятельство затрудняет построение диаграммной техники в виде, привычном для теоретиков, занимающихся бозе- и фермисистемами. И все же Вакс, Ларкин, Пикин, в своей работе [1] предложили подход, заключающийся в коммутации внутри среднего спиновых операторов с постепенным сокращением их количества. Можно назвать этот подход спиновым аналогом известной теоремы Вика. На основе данного результата

уральская группа ученых – Изюмов, Чащин и др. – разработала диаграммную технику для спиновых систем и исследовала с ее помощью модели Изинга и Гейзенберга. К сожалению, эта мощная техника оказалась примененной к очень ограниченному кругу моделей и практически не встречается сейчас в периодической научной литературе.

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

С другой стороны, попытки расчета S-матрицы, описывающей прохождение микроволновых фотонов через кубит, наталкиваются на трудности, не преодоленные на данный момент.

В качестве заключения можно сделать вывод, что рассмотренная диаграммная техника имеет очень интересные перспективы применения в задачах аналогового квантового моделирования, но на этом пути есть проблемы, ждущие своего решения.

#### Литература

1. В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикин, ЖЭТФ **26**, 188 (1968)

### **ОСОБЕННОСТИ РАСПАДА РАСТВОРОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА В ЛИТИЙ-СИЛИКАТНОМ СТЕКЛЕ**

Ефимченко В.С., Короткова М.А., Мелетов К.П.

*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН*

*efimchen@issp.ac.ru*

Согласно различным расчетам, катионы щелочных и щелочноземельных металлов способны вызвать усиление Ван-дер-ваальсового взаимодействия молекулярного водорода с окружающей решеткой и, таким образом увеличить термическую устойчивость растворов  $H_2$  [1]. Ранее, методом комбинационного рассеяния света, была изучена термическая устойчивость твердого раствора  $SiO_2-0.7H_2$ , определена энергия активации его распада  $E_a=160$  мэВ и оценена постоянная времени  $\tau \sim 13$  секунд при  $T=300$  К [2].

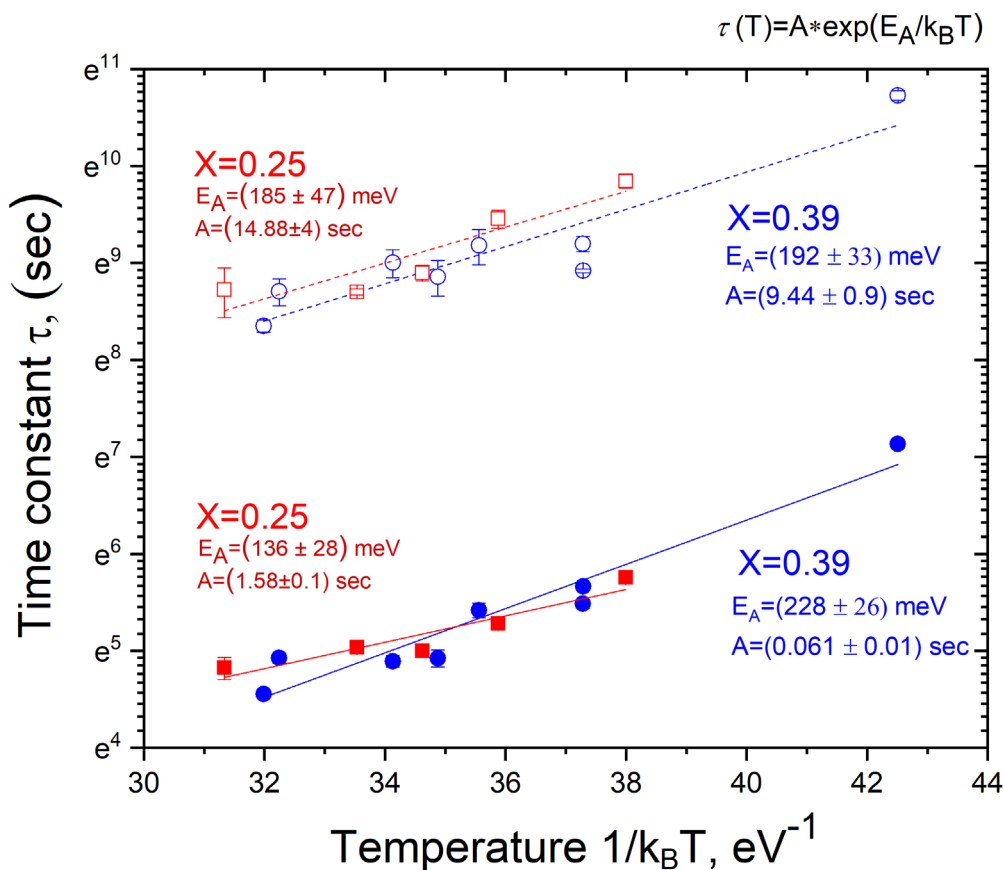


Рисунок 1. Постоянные времени  $\tau$  для распада растворов  $\text{Li}_2\text{O} \cdot 6\text{SiO}_2 - 0.39\text{H}_2$  (полные и пустые круги) и  $\text{Li}_2\text{O} \cdot 6\text{SiO}_2 - 0.25\text{H}_2$  (полные и пустые квадраты), отожженных при различных температурах  $T$ . Пунктирные и сплошные линии показывают линейную аппроксимацию экспериментальных данных для двух параллельных активационных процессов.  $k_B$  - постоянная Больцмана.

Для изучения влияния катионов лития на устойчивость твердых растворов молекулярного водорода, нами проведены исследования термической устойчивости концентрированных твердых растворов молекулярного водорода  $\text{Li}_2\text{O} \cdot 6\text{SiO}_2 - 0.39\text{H}_2$  и  $\text{Li}_2\text{O} \cdot 6\text{SiO}_2 - 0.25\text{H}_2$ , синтезированных при давлениях 7.5 и 6.6 ГПа и температуре 280 °С. Согласно данным КРС, гидрированное стекло  $\text{Li}_2\text{O} \cdot 6\text{SiO}_2$  содержало водород в молекулярной форме. Кинетика распада растворов изучалась методом изотермического отжига при  $T = 273 - 370$  К, в предварительно вакуумированном объеме. Предполагая, что при десорбции происходят два параллельных активационных процесса, полученные изотермы были аппроксимированы суммой двух экспоненциальных функций с разными постоянными времени  $\tau$ . Полученные значения постоянных времени  $\tau$  для обеих растворов

показаны на рисунке 1 в Аррениусовских координатах. При этом величины  $\tau$  для двух параллельных процессов различаются примерно в 1000 раз. В таком случае, за термическую устойчивость раствора отвечает самый медленный процесс. Его значения энергии активации  $E_a=185$  и  $192$  мэВ, примерно одинаковы для обоих растворов и немного превышают энергию активации для распада раствора  $\text{SiO}_2\text{-}0.7\text{H}_2$ . Несмотря на это, при комнатной температуре, характерные постоянные времени для данного процесса, примерно на три порядка величины выше, чем для раствора  $\text{SiO}_2\text{-}0.7\text{H}_2$  и составляют величину  $\tau\sim 16000\text{-}19000$  секунд.

Мы предполагаем, что столь высокая устойчивость растворов водорода в литий-силикатном стекле, в сравнении с кварцевым стеклом, вызвана не увеличением активационного барьера, а высоким значением предэкспоненциального множителя  $A$  в уравнении Аррениуса для медленного процесса. Его величины для обоих растворов на три порядка выше величины предэкспоненциального множителя  $A$  для раствора  $\text{SiO}_2\text{-}0.7\text{H}_2$ , что может указывать на более сложное движение молекул водорода внутри литий-силикатного стекла перед их вылетом.

#### Литература

1. E.V. Anikina, A. Banerjee, V.P. Beskachko, R. Ahuja, *Materials Today Energy*, **16**, 100421, **2020**
2. K.P. Meletov, V.S. Efimchenko, *Chem. Phys. Lett.*, **793**, 139477, **2022**

### **ЭФФЕКТ ХОЛЛА В ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ $\text{SmB}_6$**

Журкин В.С.<sup>1</sup>, Божко А.Д.<sup>1</sup>, Азаревич А.Н.<sup>1</sup>, Исхакова Л.Д.<sup>1</sup>,  
Воронов В.В.<sup>1</sup>, Шицевалова Н.Ю.<sup>2</sup>, Глушков В.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, ул. Вавилова, 38,  
Москва, 119991.*

<sup>2</sup>*Институт проблем материаловедения им. И.Францевича НАНУ,  
ул. Кржижановского, 3, Киев, 03142.  
dok5555@mail.ru*

Гексаборид самария является классической системой с сильными электронными корреляциями, в которой состояния ионов самария с

разным числом  $4f$ -электронов ( $4f^n$  и  $4f^{n-1}$ ) оказываются вырожденными [1]. Нецелочисленная валентность иона самария (для  $\text{SmB}_6$   $\nu \approx 2.6$  [2]) приводит к частичной делокализации  $4f$ -состояний и флуктуациям магнитного момента. Гибридизация локализованных  $4f$ - и зонных  $5d$ -электронов приводит к открытию щели в зонном спектре  $\text{SmB}_6$  ( $\varepsilon_g \approx 19$  мэВ [3]), что позволяет отнести это соединение к классу коррелированных узкозонных полупроводников с аномально высокими значениями эффективных масс электронов ( $\sim 30m_0$ ) и дырок ( $\sim 1500m_0$ ) [4-5].

Сильные  $4f$ - $5d$ -электронные корреляции определяют ряд аномалий транспортных свойств гексаборида самария, в частности, «насыщение» удельного сопротивления ( $\rho \sim 10 \div 100$  Ом·см), регистрируемое при  $T < 5$  К для всех монокристаллов независимо от способа их получения. Согласно модели коррелированного топологического изолятора (КТИ) [6] такая конечная проводимость обусловлена поверхностными электронами с дираковским спектром, возникающими из-за нетривиальной топологии зонной структуры  $\text{SmB}_6$  (соответствующий  $Z_2$  инвариант (1;111) [6]). Доминирующий вклад поверхностной проводимости при низких температурах подтверждают данные фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением [7-8] и эффекты нелокальной проводимости, проявляющиеся при изменении геометрии токовых путей при переходе от трехмерного к двумерному режиму электронного транспорта [9-10]. Однако направленного исследования параметров поверхностных состояний и их эволюции под влиянием дефектов, инициированных различной (абразивной, химической, плазменной и пр.) обработкой, для полярных/неполярных поверхностей  $\text{SmB}_6$  [11-12] до настоящего времени не проводилось.

В работе выполнено исследование гальваномагнитных свойств образцов  $\text{SmB}_6$  с поверхностями, ориентированными по различным кристаллографическим плоскостям (100), (110) и (111)/(211). Образцы вырезаны из одного монокристалла, выращенного методом зонной плавки с тремя проходами зоны. Обработка поверхности осуществлялась при помощи полировки на алмазном абразиве, контроль качества поверхности выполнялся на электронном микроскопе JSM-5910LV. Удельное сопротивление и эффект Холла измерялись при температурах 1,8-300 К в магнитных полях до 8 Тл. Для образца с гранями (100) был выполнен контрольный эксперимент с травлением поверхностей в водном растворе  $\text{HNO}_3$  (1:10).

В работе показано, что степень полярности и способ обработки поверхности не оказывают влияния на параметры электронного транспорта в  $\text{SmB}_6$  при  $T > 8$  К. Напротив, в режиме поверхностной проводимости при  $T < 5$  К полярная поверхность (100) после абразивной полировки демонстрирует максимальное значение сопротивления насыщения ( $\rho^{100} = 0,44$  Ом·см) и минимальные значения коэффициента Холла ( $R_H^{100}/R_H^{111} = 0,57$ ) и подвижности ( $\mu_H \approx 2,2$  см<sup>2</sup>/Вс), характеризующие поверхностные электроны. При этом заметный рост значений  $\rho^{100}$  (14,3 Ом·см),  $R_H^{100}$  (218 см<sup>3</sup>/Кл) и  $\mu_H^{100}$  (15,3 см<sup>2</sup>/Вс) после химического травления граней (100) указывает на возможность эффективного управления параметрами поверхностных состояний за счет различной обработки поверхности  $\text{SmB}_6$ .

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. G. Travaglini, P. Wachter, Phys. Rev. B **29**, 893 (1984)
5. N. Sluchanko et al., Phys. Rev. B **61**, 9906 (2000)
6. M. Dzero et al., Phys. Rev. Lett. **104**, 106408 (2010).
7. M. Neupane et al., Nat. Commun. **4**, 2991 (2013).
8. N. Xu et al., Phys. Rev. B **88**, 121102 (2013).
9. D.J. Kim et al., Nature Mater. **13**, 466 (2014).
10. S. Gabani et al., Sol. St. Sci. **47**, 17 (2015).
11. Z.-H. Zhu et al., Phys. Rev. Lett. **111**, 216402 (2013).
12. S.V. Demishev et al., Sci. Rep. **8**, 7125 (2018).

### **ЭФФЕКТ ЛИТТЛА-ПАРКСА В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ГИБРИДНЫХ СИСТЕМАХ СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ**

Залян О.В., Путилов А.В., Мельников А.С.

*Институт физики микроструктур РАН, Н. Новгород*

Классический эффект Литтла-Паркса заключается в периодическом изменении критической температуры тонкого

сверхпроводящего (S) кольца от перпендикулярно приложенного магнитного поля. В данной работе в рамках теории Гинзбурга-Ландау мы исследуем, как влияет на эту зависимость наличие спин-орбитального взаимодействия типа Рашбы, реализуемого за счёт контакта кольца с однородно намагниченным ферромагнитным изолятором (F).

Для анализа свойств сверхпроводящей плёнки мы используем функционал Гинзбурга-Ландау, который, с учётом спин-орбитального взаимодействия, имеет вид

$$F = \iiint \left[ a(T)|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{2m}|\hat{\mathbf{D}}\psi|^2 + \frac{(\text{rot}\mathbf{A})^2}{8\pi} + \varepsilon[\mathbf{n} \times \mathbf{h}]\delta(z)(\psi^*\hat{\mathbf{D}}\psi + \psi(\hat{\mathbf{D}}\psi)^*) \right] dV \quad (1)$$

где  $\psi$  - параметр порядка,  $a(T)$  и  $b$  - стандартные коэффициенты теории Гинзбурга-Ландау,  $\hat{\mathbf{D}} = -i\hbar\nabla - e\mathbf{A}/c$  - оператор удлинённой производной,  $\mathbf{A}$  - векторный потенциал,  $\mathbf{n}$  - нормаль к поверхности интерфейса,  $\mathbf{h}$  - обменное поле ферромагнитного изолятора,  $\varepsilon$  - параметр спин-орбитального взаимодействия. Последний член функционала отвечает за наличие спин-орбитального взаимодействия на S/F интерфейсе.

Минимизируя этот функционал и усредняя  $\psi$  по толщине плёнки  $d$ , мы получаем двумерное уравнение на усреднённый параметр порядка  $\psi_0$ :

$$\left( d + 2d^2 \frac{m\varepsilon}{\hbar^2} [\mathbf{n} \times \mathbf{h}]\hat{\mathbf{D}} \right) \left( a(T)\psi_0 + b|\psi_0|^2\psi_0 - \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{D}}^2\psi_0 \right) + 2\varepsilon[\mathbf{n} \times \mathbf{h}]\hat{\mathbf{D}}\psi_0 = 0 \quad (2)$$

где оператор  $\hat{\mathbf{D}}$  действует в плоскости сверхпроводника,  $d$  - толщина сверхпроводящей плёнки.

Основное отличие от классического уравнения теории Гинзбурга-Ландау заключается в наличии в уравнении третьей производной и существовании выделенного направления  $[\mathbf{n} \times \mathbf{h}]$  в плоскости сверхпроводящего слоя. Данное отличие приводит, например, к существованию диодного эффекта для критического тока [1].

В работе мы рассматриваем систему, состоящую из сверхпроводящего кольца толщины  $d$ , радиуса  $R$  и малой ширины  $s$ , однородно намагниченного ферромагнитного изолятора и магнитного поля  $H$ , приложенного перпендикулярно плоскости кольца (рис. 1а).



Нашей задачей было найти зависимость критической температуры  $T_c$  от потока магнитного поля через кольцо  $\Phi = \pi R^2 H$ . Задача на поиск критической температуры сводится к поиску максимальной температуры, при которой линейризованное уравнение (2) имеет решение. При  $d, s \ll \sqrt{\frac{\hbar^2}{4m|a(T)|}}$  уравнение сводится к одномерному с единственной переменной  $\varphi$ .

В пренебрежении членами, отвечающими за наличие спин-орбитального взаимодействия ( $\hbar\epsilon = 0$ ) мы получаем классический эффект Литтла-Паркса (рис 1б, сплошная линия). В пренебрежении наименьшими поправками по  $d$  (третьими производными), мы получаем увеличение критической температуры, не зависящее от потока магнитного поля  $\Phi$  (пунктирная линия). С учётом третьих производных мы получаем сглаживание зависимости температуры от потока магнитного поля  $\Phi$  вблизи точек, отвечающих полуполному значению величины  $\Phi/\Phi_0$ , где  $\Phi_0 = \pi\hbar c/e$  - квант магнитного потока (точечная линия).

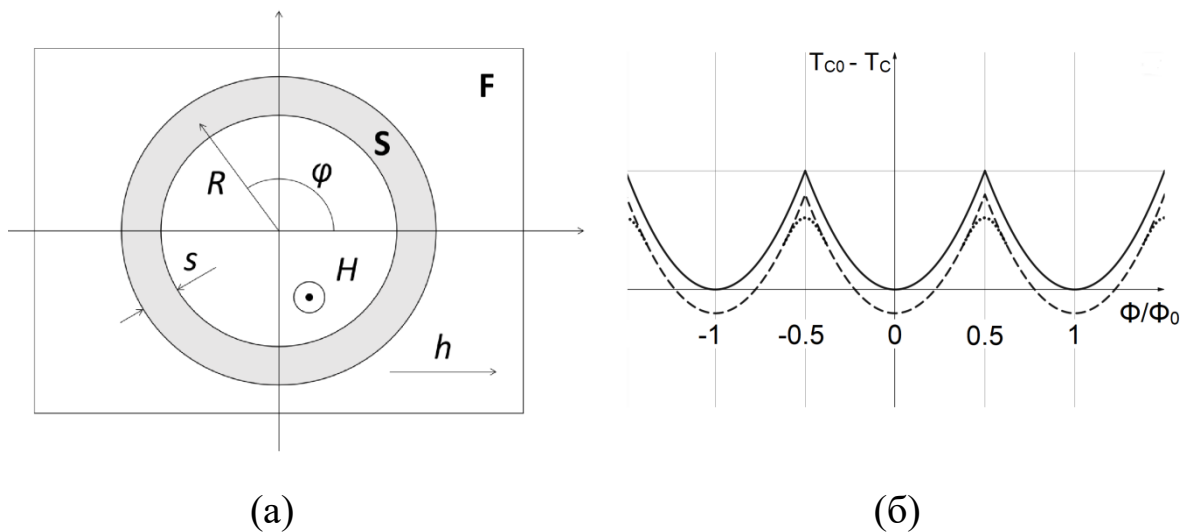


Рис 1. (а) - схематичное изображение системы, вид сверху; (б) - схематичное изображение зависимости критической температуры  $T_c$  от потока магнитного поля  $\Phi$  в разных приближениях.  $T_{c0}$  - критическая температура бесконечного сверхпроводника без магнитного поля.

Работа выполнена при поддержке грантом РФФ № 21-72-10161.

### Литература

1. A. Daido, Y. Ikeda, and Y. Yanase, Phys. Rev. Lett., **128**, 037001, 2022

# ОСОБЕННОСТИ РАСЧЁТА ОСНОВНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ РЕЗУЛЬТАТИВНОСТИ НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ В СОВРЕМЕННОЙ ДЕЙСТВИТЕЛЬНОСТИ

Захарова Е.В.<sup>1,2</sup>, Борзенкова Е.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991 Москва, ул. Вавилова, 38*

<sup>2</sup> *Редакция журнала «Успехи физических наук», 119991 Москва, Ленинский просп., 53  
elena.zakharova.office@gmail.com*

В настоящий момент на различных площадках, в том числе и на самом высоком уровне, бурно обсуждаются различные системы оценки научной деятельности и, в частности, создание Российской системы оценки научной деятельности. Возможность создания подобной системы ранее обсуждалась в связи с повышением эффективности научной деятельности, но в последнее время актуальность её создания возросла из-за прекращения доступа с территории РФ к международной библиометрической базе данных Web of Science (WoS). Системы оценки научной деятельности позволяют рассчитать показатели результативности научной работы, от которых, в свою очередь, зависят планирование работы научных коллективов и стимулирующие выплаты научным работникам. Существует несколько вариантов системы оценки научной деятельности, наиболее важными из которых являются следующие:

1. оценка публикационной активности посредством статистического аппарата библиометрических баз данных;
2. применение экспертных механизмов оценки научной деятельности.

Считается, что использование обеих оценок даёт возможность наиболее полно оценить результаты деятельности как научного коллектива, так и каждого научного работника.

В ФИЦ «Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН» системы оценки научной деятельности применяются, в частности, для расчёта стимулирующих выплат научным работникам, а также при проведении конкурсов на замещение вакантных должностей научных работников.

В связи с невозможностью использовать на территории РФ функционала WoS возрастает актуальность создания и развития собственных баз данных научных организаций. Конечно, в подобных местных библиометрических базах возможности анализа

публикационной активности научного коллектива в мировом масштабе очень ограничены, но для расчёта показателей результативности научной деятельности, определения соответствия кандидата на вакантные должности и некоторых других организационно-научных задач подобные базы данных существенно облегчают работу административного аппарата и защищают при возможных форсмажорных обстоятельствах, таких, как, например, неожиданное отключение доступа к WoS.

Местные базы данных удобны ещё и потому, что в них можно добавить информацию об экспертной оценке, которой обычно не бывает в международных или региональных библиометрических базах данных, а также настроить функционал базы под нужды конкретной организации.

В качестве библиометрических показателей в таких базах можно использовать показатели, рассчитанные в международных и региональных базах данных, такие как импакт-факторы и квартили журналов, различные библиометрические индексы авторов научных публикаций и т.д., а также разрабатывать собственные показатели.

В докладе будут продемонстрированы различные варианты аналитической отчётности по результатам научной деятельности и возможности визуализации этой отчётности на интернет-сайте ИОФ РАН, а также способы пополнения информационно-аналитической базы ИОФ РАН за счёт внешних и внутренних источников.

Создание национальной системы оценки результативности научных исследований и разработок, а также развитие местных информационно-аналитических баз данных позволит не зависеть от внешних обстоятельств и более полно учитывать и стимулировать научную активность учёных и коллектива научного учреждения.

Авторы благодарны профессору С.В. Демишеву за ценные советы и конструктивные замечания при подготовке доклада.

## **СТРУКТУРА И СВОЙСТВА МОДИФИКАЦИИ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ VO<sub>2</sub>(S).**

Зибров И.П., Филоненко В.П., Сидоров В.А., Щелкачев Н.М.,  
Магницкая М.В.

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

Диоксид ванадия имеет две модификации, стабильные при обычном давлении - VO<sub>2</sub>(R) (T>70 C) [1] и VO<sub>2</sub>(M1) (T<70 C) [2] и

является типичным материалом с сильными электронными корреляциями, в котором наблюдается переход металл-изолятор ( $R \rightarrow M1$ ). Еще две модификации были синтезированы в гидротермальных условиях -  $VO_2(A)$  [3] и  $VO_2(B)$  [4]. В условиях высоких давлений были получены модификации  $VO_2(M2)$  и  $VO_2(M3)$  [5].

Новая модификация  $VO_2$  со структурой симпсонита  $Al_4Ta_3O_{13}(OH)$ ,  $VO_2(S)$ , была получена при термобарической обработке стехиометрической смеси порошков  $V_2O_3+V_2O_5$  при  $P = 2.0-7.0$  ГПа и  $T = 600-900$  С в камерах «тороид». Её кристаллическая структура была уточнена методом Rietveld refinement (Рис.1а) с использованием рентгеновской порошковой дифракции:  $a=7.35367(3)$  Å,  $c=4.51507(4)$  Å,  $V=211.448(1)$  Å<sup>3</sup>,  $Z=7$ , П.Г. Р 3. Атомы ванадия находятся в шестерной координации из атомов кислорода в виде искаженного октаэдра [VO6]. Строительным элементом двухслойной структуры являются три октаэдра, соединенные ребрами. В одном слое октаэдры образуют сплошную сетку, тогда как в другом располагаются отдельные «островки» (Рис.1б).

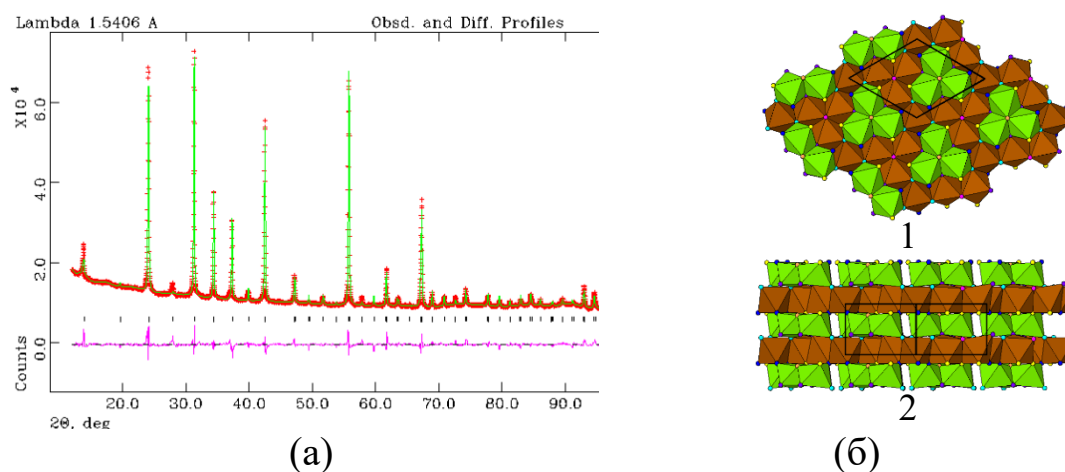


Рис.1. Полнопрофильный анализ (а) и структура (б)  $VO_2(S)$ . а - экспериментальные (+), рассчитанные (сплошная линия) и разница между экспериментальными и рассчитанными данными (нижняя кривая) рентгеновской дифракции; б - структура  $VO_2(S)$ , состоящая из октаэдров [VO6]: 1 – в направлении [001]; 2 - в направлении [110]. Маленькие сферы в вершинах октаэдров – атомы О.

При температуре  $T_c = 290$  К в  $VO_2(S)$  обнаружен изоструктурный переход типа металл-полупроводник со скачком объёма 0.26% и небольшим гистерезисом  $\sim 2$  К. Выше  $T_c$  материал является «плохим металлом» со слабой полупроводниковой зависимостью электрического сопротивления от температуры и величиной коэффициента Зеебека -50 мкВ/К, что указывает на преимущественно

электронный тип носителей тока. Ниже  $T_c$  зависимость сопротивления от температуры полупроводниковая (рост сопротивления на четыре порядка при 290-120 К), а коэффициент Зеебека меняет знак, что указывает на дырочный тип проводимости. Предварительные измерения магнитной восприимчивости и теплоёмкости  $\text{VO}_2(\text{S})$  указывают на наличие антиферромагнитного перехода при температуре  $T_N = 49.5$  К. Были также проведены расчёты из первых принципов зонной структуры  $\text{VO}_2(\text{S})$  комбинированным методом Хартри-Фока/функционала плотности и сделана оценка электронных транспортных свойств в рамках полуклассического приближения Больцмана. Расчёты с помощью программы USPEX предсказали существование антиферромагнитной фазы  $\text{VO}_2(\text{S})$  при низкой температуре и определили её уникальную магнитную структуру. Проведены исследования зависимости электрического сопротивления и теплоёмкости  $\text{VO}_2(\text{S})$  от температуры при гидростатическом давлении до 5.2 ГПа.

#### Литература

1. V.M. Goldschmidt, T. Barth, D. Holmsen, G. Lunde, W.H. Zachariasen, Skrifter utgitt av det Norske Videnskaps-Akademi i Oslo 1: Matematisk-Naturvidenskapelig Klasse, **9**, 1, **1926**.
2. G. Andersson, Acta Chemica Scandinavica, **10**, 623-628, **1956**.
3. Y. Oka, S. Sato, T. Yao, N. Yamamoto, J. of Solid State Chem., **141**, 594-598, **1998**.
4. Y. Oka, T. Yao, N. Yamamoto, J. of Solid State Chem., **105**, 271-278, **1993**.
5. B.L. Chamberland, J. of Solid State Chem., **7**, 377-384, **1973**.

### **МАЙОРАНОВКИЕ МОДЫ НА РАЗЛИЧНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТАХ 2D СВЕРХПРОВОДНИКОВ**

Злотников А. О., Аксенов С. В., Федосеев А. Д., Шустин М. С.  
*Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения  
Российской академии наук, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск  
zlotn@iph.krasn.ru*

Известно, что 2D топологические сверхпроводники (ТС) характеризуются наличием ветви краевых возбуждений в спектре, в отличие от сверхпроводящих нанопроволок, в которых имеется только несколько уровней энергии, соответствующих краевым

состояниям. В этой связи нулевые моды в 2D ТС распространяются вдоль границ решетки, что делает их неприменимыми для квантовых вычислений. Однако 2D ТС допускают наличие майорановских мод на топологических дефектах (см., например, обзор [1]).

В работе рассмотрена локализация майорановских мод на различных топологических дефектах: 1) углы 2D решетки топологических сверхпроводников высокого порядка (ТСВП); 2) вихри Абрикосова на треугольной решетке в ТС с неколлинеарным магнитным упорядочением. Для применений в квантовых вычислениях отмеченные системы с топологическими дефектами имеют явное преимущество перед сверхпроводящими нанопроволоками, в связи с возможностью перестановки майорановских мод без пересечения их траекторий (операция брэйдинга). С использованием сверхпроводящих нанопроволок брэйдинг был продемонстрирован только для T-, X- и Y-структур.

Ранее [2] нами было показано индуцирование нулевых мод, локализованных вблизи вихревых нитей, в киральном  $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$  сверхпроводнике на треугольной решетке при наличии дальнего неколлинеарного спинового упорядочения. Существенно, что при отсутствии магнитного порядка нулевые моды в  $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$  ТС отсутствуют, а связанные состояния в ядре вихря реализуются с конечной энергией возбуждения [3, 4]. Это связано с тем, что фаза  $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$  сверхпроводящего параметра порядка в квазиимпульсном пространстве обладает четным, а не нечетным, числом кручений при обходе по замкнутой траектории [4, 5].

Продемонстрирована локализация майорановских мод для различных вихревых структур в рассматриваемом магнитном ТС: одиночный вихрь или антивихрь, пара вихрей и пара вихрь-антивихрь, четыре вихря.

На основе расчета локальной плотности состояний (LDOS) вблизи ядра вихря показано, что найденные вихревые майорановские моды достаточно отделены по энергии от других подщелевых состояний. Данное обстоятельство существенно для обнаружения таких мод с помощью сканирующего туннельного микроскопа. При этом моды, соответствующие краевым состояниям, сливаются друг с другом в результатах LDOS вблизи границ решетки. Определены различия для DOS вблизи ядра вихря и ядра антивихря, содержащих майорановские моды.

В отмеченных направлениях нами были также получены перечисленные ниже результаты, которые будут отражены в докладе:

1. В рамках модели [6], описывающей гетероструктуру из 2D топологического изолятора (ТИ) (типа полупроводников XY ( $X = \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$  и  $Y = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ )) и сверхпроводника с расширенным s- или d-типом симметрии сверхпроводящего параметра порядка, при учете зарядовых корреляций определены условия формирования майорановских мод, локализованных в углах 2D ТСВП. Считается, что электрон-электронные взаимодействия важны в 2D ТИ [7].
2. Получена эффективная модель, описывающая 2D ТСВП в режиме сильных электронных корреляций, с использованием проекционной техники Цванцига-Мори, а также определен спектр системы и структура квазичастичных возбуждений.

Результаты получены при поддержке РФФ № 22-22-20076.

#### Литература

1. A. O. Zlotnikov, M. S. Shustin, and A. D. Fedoseev, J Supercond Nov Magn, **34**, 3053, **2021**
2. A. O. Zlotnikov, arXiv:2205.03603, **2022**
3. D. Lee and A. P. Schnyder, Phys. Rev. B, **93**, 064522, **2016**
4. G. E. Volovik, JETP Lett., **104**, 201, **2016**
5. G. E. Volovik, JETP Lett., **70**, 609, **1999**
6. Q. Wang, C.-C. Liu, Y.-M. Lu, and F. Zhang, Phys. Rev. Lett., **121**, 186801, **2018**
7. C. Zhang, Y. Liu, X. Yuan et al., Nano Lett., **15**, 2161, **2015**

### **ВЛИЯНИЯ ДАВЛЕНИЯ И СКОРОСТИ ОХЛАЖДЕНИЯ НА ОБРАЗОВАНИЕ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В СПЛАВАХ Al-Cu-Fe**

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

<sup>1</sup>УдмФИЦ УрО РАН

<sup>2</sup>ИФВД РАН

*lara\_kam@mail.ru*

Методами рентгеноструктурного, дифференциально-термического и металлографического анализов исследованы особенности кристаллизации икосаэдрической квазикристаллической

фазы в системе Al-Cu-Fe (*i*-фаза) при различных условиях охлаждения расплава. Исследования проводили в широкой области концентраций, включающей стехиометрическую концентрацию, а также область составов, где *i*-фаза первой образуется из расплава.

ДТА сплавов в режиме нагрева и охлаждения с небольшими (0,1-1К/с) скоростями охлаждения позволил построить концентрационные срезы тройной диаграммы состояния при 25,5 ат.% Cu (2,5-25 ат.% Fe), 5,8 и 12,5 ат.% Fe (15-40 ат.% Cu), а также определить особенности образования *i*-фазы при нормальном давлении. 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<sub>3</sub>Fe, при концентрации от 25,5 до 35 ат.% Cu на первой стадии выделяются кристаллы твердого раствора на основе Al<sub>3</sub>Cu. В области концентраций, где *i*-фаза зарождается первой из расплава (Al<sub>95,5+x</sub>Cu<sub>35,5-x</sub>Fe<sub>5,8</sub>, где  $x=0-15$ ), величина переохлаждения и характер кристаллизации зависят от температуры расплава перед охлаждением. При охлаждении от температур <1050°C сплавы затвердевают в условиях небольших переохлаждений согласно диаграмме состояния (кристаллизация начинается с образования *i*-фазы). При увеличении температуры расплава характер затвердевания резко изменяется, в условиях больших переохлаждений (более 60°C) кристаллизация протекает без образования *i*-фазы.

Увеличение скорости охлаждения до 10<sup>2</sup>-10<sup>3</sup> К/с приводит к увеличению долей *i*-фазы и тройной фазы Al<sub>7</sub>Cu<sub>2</sub>Fe ( $\omega$ ) в исследованных сплавах. При скорости охлаждения 10<sup>5</sup> К/с в сплавах, богатых Al, появляется аморфная фаза.

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<sub>3</sub>Al, 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/>



# ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОГРАНИЧЕНИЯ

Капуткина Н. Е., Алтайский М. В.

*Национальный исследовательский технологический университет*

*«МИСиС», г. Москва*

*Институт космических исследований РАН, г. Москва*

*kaputkina.ne@misis.ru, altaisky@rssi.ru*

Исследования систем искусственного интеллекта (ИИ) активно ведутся последние десятилетия. Системы ИИ с успехом используются в распознавании объектов, в обработке больших массивов данных. Развитие современных процессоров и графических ускорителей в сочетании с методами глубокого обучения позволили эффективно изучать и создавать нейронные сети, применяемые для решения практических задач, таких как перевод речи и текста, классификация изображений и т. д. Значительным потенциалом для применения для систем обработки информации обладают системы квантовых точек (КТ) в связи с масштабируемостью технологии производства массивов КТ, миниатюрностью отдельных элементов, а также возможностью контролировать их состояние путем приложения внешних электрических и магнитных полей. Когерентные осцилляции между различными состояниями, описываемыми матрицей плотности, сохраняются вплоть до температур в несколько десятков градусов Кельвина. Наблюдаемый эффект перепутывания при слабом диполь-дипольном взаимодействии и сильной диссипации может быть интересен 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.

Рассматриваются алгоритмические и неалгоритмические методы квантовой обработки информации, а также их применение к построению систем искусственного интеллекта. 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**

## СПОСОБЫ ОПТИМИЗАЦИИ МАКРО- И МИКРОСТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОРИСТОГО СПЛАВА НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА

Кафтаранова М. И., Аникеев С.Г., Артюхова Н.В., Ходоренко В.Н.  
*Национальный исследовательский Томский государственный  
университет*  
*kaftaranovami@gmail.com*

Пористые сплавы TiNi, полученные методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза, находят распространение в качестве имплантатов способных замещать фрагменты костей и хрящей, а также клеточных инкубаторов для культивирования клеток [1,2]. Для ускорения процессов интеграции клеточных культур в поровом пространстве материала необходима мелкопористая структура с узким распределением макропор по размерам и большим количеством микропор в структуре поверхности стенок пор. Достичь этого традиционными методами такими как использование различных температурных режимов и типов порошков невозможно. Данная работа направлена на оптимизацию макро и микроструктурных характеристик пористого сплава на основе TiNi, создание микропористой поверхности стенок пор СВС-материала используя дополнительный метод химического травления.

Пористые сплавы TiNi получены методом СВС. Перед проведением процесса СВС порошки Ti и Ni сушили в вакуумном шкафу при температуре 60–70°C в течение 7 ч, затем смешивали в

смесителе около 6ч. Шихту засыпали в кварцевую колбу и уплотняли до пористости 45-50%. Далее кварцевую трубку с шихтой устанавливали в реактор и подвергали предварительному нагреву до 400°C. Высокотемпературный синтез инициировали путем короткого замыкания электрической цепи на открытой стороне кварцевой трубки. Полученный пористый сплав обработали методом химического травления в растворе кислот HNO<sub>3</sub> (30 мл), HF (10 мл), H<sub>2</sub>O (30 мл), температура смеси составляет 50-70°C, время погружения от 3 до 4 сек. После чего образец погружают в воду на 10-12 часов. Структурные особенности сплавов исследовали методом растровой электронной микроскопии на микроскопе (SEM) в режиме вторичных (SE) и обратно-отраженных электронов (BSE) Quanta 200 3D с энергодисперсионным спектрометром EDAX ECON IV.

Исследование макроструктуры пористых образцов, полученных при температуре начала синтеза 400°C без травления, показало, что поровое пространство занимает 75 % от общего объема материала. Отличительной особенностью является однородная мелкопористая структура. Средний размер пор 150 мкм. Средний размер межпоровых перегородок 127 мкм. Поверхностный слой металлической матрицы имеет переменную толщину и состоит из оксикарбонитридов Ti<sub>4</sub>Ni<sub>2</sub>(O,N,C). Данные фазы в структуре поверхностного слоя располагаются крайне неоднородно и усложняют внутреннее строение стенок пор. Химическим травлением можно создавать микропоры, размер которых соответствует размеру вытравливаемых частиц с поверхности пор. Состав травителя подбирается так, чтобы вытравливанию были подвержены именно фазы Ti<sub>2</sub>Ni и Ti<sub>4</sub>Ni<sub>2</sub>(O,N,C). На первом этапе травление привело к удалению оксикарбонитридного слоя, под которым находился дендритный рельеф, состоящий из фазы TiNi, междендритных прослоек Ti<sub>2</sub>Ni, фазы Ti<sub>2</sub>Ni и более крупных частиц Ti<sub>4</sub>Ni<sub>2</sub>(O,N,C). На втором этапе начинают вытравливаться междендритные прослойки и частицы вторичных фаз, образуя микропористую поверхность стенок пор. На третьем этапе происходит удаление с поверхности стенок пор слоя с зоной дендритной ликвации и вытравливанием одиночных частиц вторичных фаз в теле зерен матрицы TiNi. Полученная в итоге структура соответствует выраженной шероховатой микропористой поверхности стенок пор. Доля микропор размером менее 50 нм выросла с 59 до 68 %, и количество пор более 1 мкм выросло в два раза с 11 до 22 %. При этом пористость и средний размер пор остаются практически теми же, что и до травления.

Таким образом, показано, что полученная структура поверхности стенок пор после травления обладает более высокими адгезивными свойствами для взаимодействия с клеточными культурами. Пory размером более 1 мкм являются хранилищем питательных веществ на поверхности стенок пор материала и выполняют питательную функцию для развивающихся клеток.

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**.
2. E. D. James, P. Charbord. Stem Cells., **19**, 3, **2003**.

## **МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ С ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЁТКОЙ PdCrO<sub>2</sub>**

Комлева Е. В., Ирхин В. Ю., Стрельцов С. В.

*Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург  
komleva@imp.uran.ru*

Некоторые соединения из семейства дельтафосфитов, такие как PdCrO<sub>2</sub>, PdCoO<sub>2</sub> или PtCoO<sub>2</sub>, демонстрируют аномально высокую проводимость, одного порядка или даже превышающую проводимость чистых металлов. Более того, в этих слоистых системах с треугольной решёткой магнитных атомов Cr наблюдаются интересные магнитные свойства.

Параметр фрустрации, представляющий из себя отношение парамагнитной температуры Кюри  $\Theta_{CW}=500$  К к температуре магнитного перехода  $T_N=37$  К, в соединении PdCrO<sub>2</sub> порядка 13, что свидетельствует о сильной фрустрации в системе [1, 2].

Из первых принципов были рассчитаны параметры изотропного обменного взаимодействия в модели Гайзенберга. Оцененная из полученных значений температура Кюри-Вейсса совпадает с экспериментальной. Расчёт температуры магнитного перехода в рамках достаточно точного метода – самосогласованной спин-волновой теории [3, 4] – даёт значение температуры Нееля, в три раза

превышающее экспериментальное. Учёт влияния одноионной анизотропии и внутривоскостных фрустраций не приводит к качественно лучшему согласию рассчитанной величины с экспериментальным результатом. Это даёт основания полагать, что модели Гайзенберга недостаточно для корректного описания магнитных свойств  $\text{PdCrO}_2$ . В частности, например, эта система может быть кандидатом для реализации модели решётки Кондо.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ 20-62-46047.

### Литература

1. M. Mekata *et al.*, Phys. B, 213, 221, **1995**
2. H. Takatsu *et al.*, Phys. Rev. B, 79, 104424, **2008**
3. B. Schmidt, M. Siahatgar, and P. Thalmeier, EPJ Web Conf. 40, 04001, **2013**.
4. B. Schmidt and P. Thalmeier, Phys. Rep. 703, 1, **2017**.

## ДЕКОРИРОВАНИЕ АЛМАЗА МЕТАЛЛОМ ДЛЯ СОЗДАНИЯ МЕТАПОВЕРХНОСТИ ИК ДИАПАЗОНА

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

*komlenok@nsc.gpi.ru*

Большой интерес к среднему ИК-диапазону обусловлен прозрачностью атмосферы в интервале 8-10 мкм, что актуально для различных применений, включая военно-технические [1]. Кроме того, в этой области лежат линии поглощения колебательных переходов многих молекул, что дает возможность осуществлять мониторинг атмосферы. Поэтому разработка новых материалов и оптических элементов, в том числе с использованием метаповерхностей, интенсивно исследующихся в последнее десятилетие, является весьма актуальной и имеющей большую фундаментальную и практическую научную значимость задач.

Для создания оптических элементов среднего ИК диапазона обычно используют нетрадиционные материалы с еще недостаточно отработанными технологиями, что делает затраты на производство высокими. Например, оптические компоненты среднего ИК-диапазона изготавливаются из германия, халькогенидных или галогенидных кристаллов вместо стандартных оптических материалов, таких как стекла, которые становятся непрозрачными. Недавно стали разрабатываться волноводы в среднем ИК диапазоне на основе алмаза, для структурирования которого используется довольно трудоемкий процесс травления в индуктивно-связанной плазме [2, 3]. Альтернативным методом обработки алмаза является метод реактивного ионного травления [4] или травление с помощью сфокусированного ионного пучка (FIB) [5].

В данной работе предлагается оригинальный метод селективной металлизации поверхности алмаза для создания метаповерхности ИК диапазона. На первом этапе резистивным испарением в вакуумной камере наносится сплошным слоем медь, а на втором – удаляются лишние его части методом лазерной абляции. Для осуществления селективного удаления тонкого слоя металла с поверхности исследуются такие условия лазерного облучения, что не вызывают графитизацию алмаза, находящегося под пленкой металла. Оптические свойства полученных оптических элементов изучены с помощью ИК-спектрометра. Будет обсуждаться сравнение экспериментальных спектров и смоделированных.

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

## Литература

1. J. Hu, J. Meyer, K. Richardson, L. Shah, *Opt Mater Express*, **3**, 1571, **2013**
2. X. Wang, et al. *Anal Chem*, **86(16)**, 8136, **2014**
3. M. Malmström, M. Karlsson, P. Forsberg, Y. Cai, F. Nikolajeff, F. Laurell, *Optical Materials Express*, **6(4)**, 1286, **2016**
4. M. P. Hiscocks, K. Ganesan, B. C. Gibson, S. T. Huntington, F. Ladouceur, S. Praver, *Opt Express*, **16**, 19512, **2008**
5. 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**

# КВАНТОВАЯ ПРИРОДА ЯДЕР ЧЕРЕЗ ИНТЕГРАЛЫ ПО ТРАЕКТОРИЯМ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКЕ

Кондратюк Н.Д.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский университет  
«Высшая школа экономики»*

<sup>2</sup>*Объединенный институт высоких температур РАН  
nkondratyuk@hse.ru*

Обзорный доклад посвящен формулировке квантовой теории через фейнмановские интегралы по траекториям, а также применению данного метода в расчетах физико-химических свойств [1]. В докладе будут рассмотрены как теоретические аспекты интерпретации (основные понятия, вывод интегралов по траекториям через каноническую матрицу плотности и оператор эволюции времени), так и переход к численным реализациям: молекулярной динамике центра [2] и молекулярной динамике зацикленного полимера [3].

На примерах работ будут продемонстрированы возможности метода по расчету структурных свойств [4], уравнений состояния, колебательных спектров [5], коэффициентов переноса, констант химических реакций [6]. Отдельное внимание уделено возможности данного подхода рассчитывать квантовые корреляционные функции в реальном времени. Будут представлены наши первые результаты по расчету фазовой диаграммы плотного разогретого водорода.

Работа частично подготовлена в ходе проведения исследования в рамках Программы фундаментальных исследований Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ).

## Литература

1. Tuckerman M. Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation. Oxford: Oxford University Press, 696 p., **2010**.
2. Cao, J., Voth, G.A., J. Chem. Phys., 100, 5093–5105, **1994**.
3. Craig, I.R., Manolopoulos, D.E., J. Chem. Phys., 121, 3368–3373, **2004**.
4. Habershon, S., Markland, T.E., Manolopoulos, D.E., J. Chem. Phys., 131, 024501, **2009**.

5. Witt, A., Ivanov, S.D., Shiga, M., Forbert, H., Marx, D., J. Chem. Phys., 130, 194510, **2009**.
6. Suleimanov, Y.V., Aoiz, F.J., Guo, H., J. Phys. Chem. A, 120, 8488–8502, **2016**.

## **ВЛИЯНИЕ МЕЖСЛОЕВОГО СПАРИВАНИЯ НА НАВЕДЕННУЮ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И МЕЙССНЕРОВСКИЙ ОТКЛИК ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ**

Копасов А. А., Мельников А. С.

*Институт физики микроструктур РАН, ул. Академическая, д. 7,  
Нижний Новгород, 607680*

В ряде экспериментов было установлено, что экранирующие свойства сверхпроводящих цилиндров, покрытых слоем благородного металла Au или Ag могут существенно отличаться от предсказаний микроскопической теории сверхпроводимости [1,2]. В частности, в таких структурах наблюдался так называемый возвратный диамагнетизм – появление дополнительного парамагнитного отклика на фоне диамагнитного. В литературе было предложено несколько объяснений данного явления. Одно из них связано с наличием отталкивающего электрон-электронного взаимодействия в слое нормального металла, которое объясняет возвратный диамагнетизм за счет появления локализованных состояний квазичастиц вблизи S/N границы.

В данной работе проанализировано влияние межслоевого взаимодействия между электронами [4-6] в гибридных структурах двумерный электронный газ (2DEG) – сверхпроводник на плотность состояний для квазичастиц и плотность сверхпроводящего конденсата в двумерной электронной системе. Вторая из данных величин определяет вклад данного слоя в экранирующие свойства гибридной структуры. Для простоты притяжение между электронами в S слое и межслоевое электрон-электронное взаимодействие учитываются в рамках теории среднего поля. В работе показано, что спин-триплетное межслоевое электрон-электронное взаимодействие приводит к появлению нечетных по мацубаровской частоте спин-триплетных сверхпроводящих корреляций в 2DEG и дополнительного спинового расщепления для квазичастиц. Данные эффекты проявляются в



немонотонной зависимости плотности сверхпроводящих пар от температуры и многопиковой структуре плотности состояний. Таким образом, межслоевое спин-триплетное электрон-электронное взаимодействие представляет собой возможный механизм появления возвратного диамагнетизма в гибридных структурах сверхпроводник – нормальный металл.

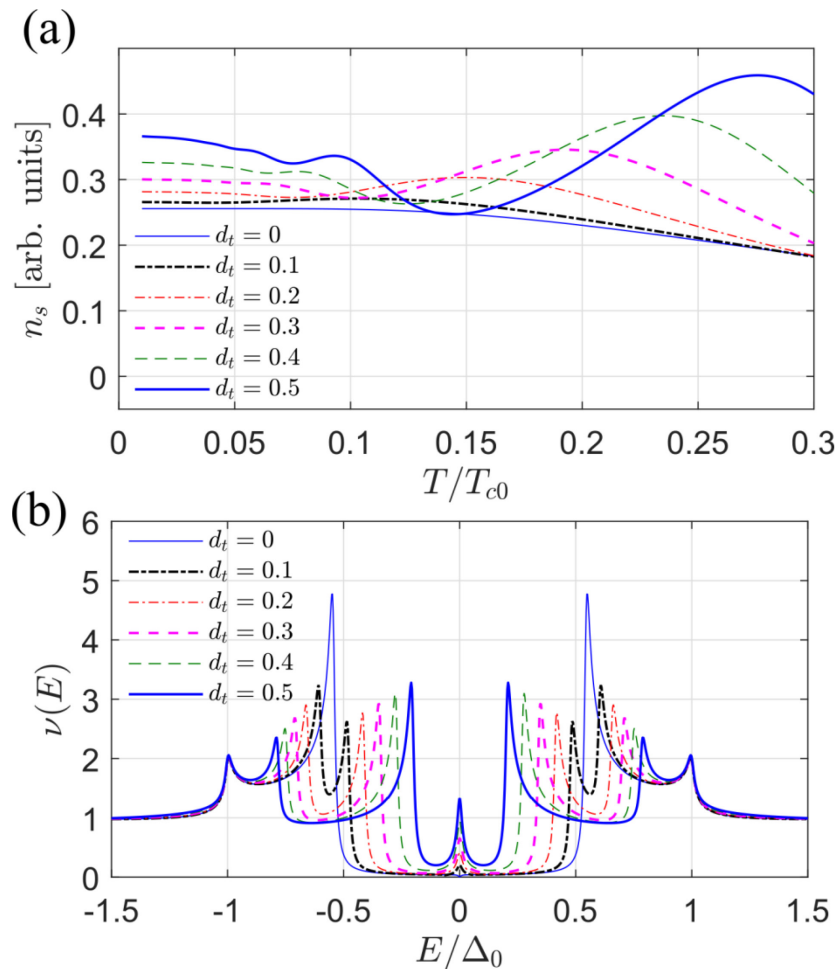


Рис.1 (а) Типичные зависимости плотности сверхпроводящего конденсата  $n_s$  от температуры  $T$ . (б) Нормированная плотность состояний для квазичастиц в двумерной электронной системе. Здесь  $T_{c0}$  – температура сверхпроводящего перехода S слоя,  $d_t^2$  – сила межслоевого спин-триплетного взаимодействия, и  $t^2 = 1$  – частота туннелирования (взяты в единицах  $T_{c0}$ ).

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 20-12-00053.

#### Литература

1. P. Visani, A. C. Mota, A. Pollini, Phys. Rev. Lett. **85**, 1514, **1990**
2. F. B. Muller-Allinger, A. C. Mota, Phys. Rev. B, **62**, R6120, **2000**

3. A. L. Fauchere, W. Belzig, G. Blatter, Phys. Rev. Lett. **82**, 3336, 1999
4. K. B. Efetov, A. I. Larkin, JETP **41**(1), 76, 1975
5. Z. Tesanovic, Phys. Rev. B **36**, 2364(R), 1987
6. L. N. Bulaevskii, M. V. Zyskin, Phys. Rev. B **42**, 10230, 1990

## СИНТЕЗ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ АЭРОГЕЛЯ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ С ВКЛЮЧЕНИЯМИ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ АЛМАЗОВ

Короткова М.А.

*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна*

*Российской академии наук, г. Черноголовка*

*korotkova@issp.ac.ru*

Основными препятствиями для широкого применения ультрадисперсных алмазов выступают их агрегация и наличие графитоподобной  $sp^2$ -оболочки. Целью данной работы было изучение возможности создания при высоком давлении плотного и оптически прозрачного композита из аэрогеля на основе диоксида кремния с включениями одиночных наноалмазов. Исходный аэрогель  $SiO_2$ , содержащий 5.5 вес.% детонационных алмазов, был получен в ИФАВ РАН методом сверхкритической сушки [1].

В результате необратимого уплотнения аэрогеля при давлении 7.5 ГПа и температуре 250 °С в ИФТТ РАН был получен композит в форме темной таблетки с гладкой поверхностью диаметром 5 мм и толщиной 1.5 мм. Рентген-дифракционное исследование при атмосферном давлении и комнатной температуре показало, что аморфная  $SiO_2$  матрица образца кристаллизовалась в коэсит. Дифракционные линии наноалмаза не наблюдались. Спектр комбинационного рассеяния света полученным образцом измерить не удалось из-за сильной люминесценции. Следует отметить, что кристаллизация в коэсит у массивных образцов аморфного  $SiO_2$  происходит при значительно более высоких температурах порядка 700–900 °С [2].

После гидрирования плотного композита  $SiO_2$ /наноалмазы при давлении водорода 7.5 ГПа и температуре 600 °С в течение 1 часа образец сохранил свою форму и размеры. Сколько-нибудь заметных изменений не произошло и в картине рентгеновской дифракции. Цвет композита изменился с темно-серого на светло-серый. Значительное

уменьшение люминесценции позволило измерить спектр комбинационного рассеяния света, представленный на Рис.1 (комнатная температура; спектрометр HRS-500; лазер с длиной волны 532 нм).

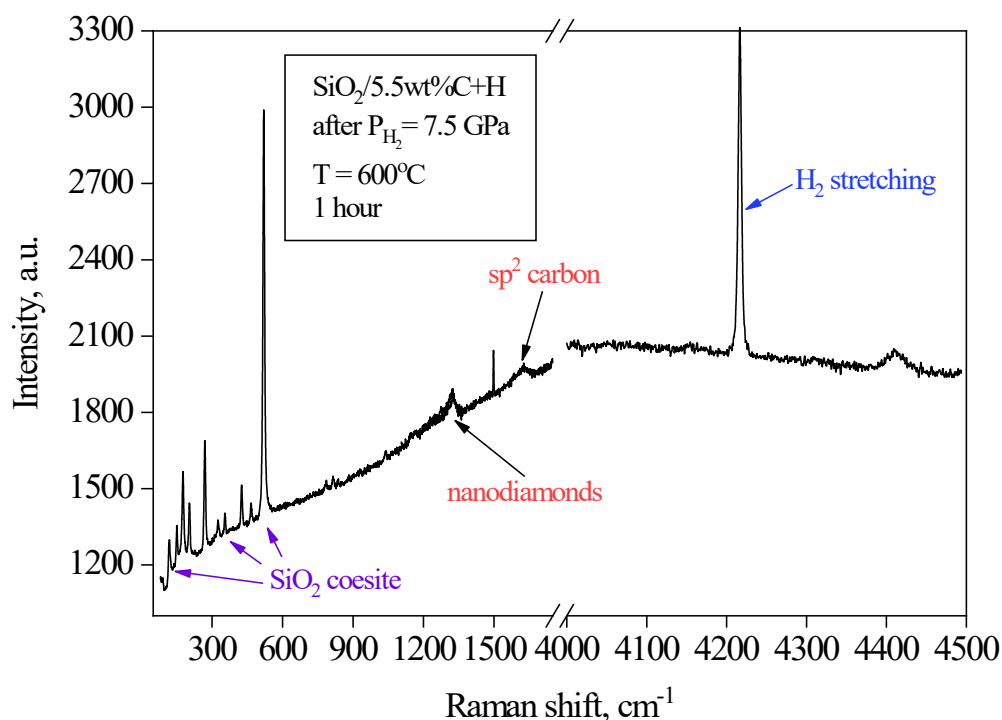


Рис.1. Спектр комбинационного рассеяния света уплотненным композитом SiO<sub>2</sub>/наноалмазы (5.5 вес.% C) после его насыщения водородом при высоком давлении.

Наличие спектра комбинационного рассеяния света и линий, представленных на рисунке, показывает, что при высоком давлении и температуре водород внедряется в SiO<sub>2</sub> матрицу композита, пассивирует люминесцентные центры, образовавшиеся при компактировании аэрогеля, а наноалмазы при этом сохраняются. Рентгеноспектральный микроанализ и инфракрасная спектроскопия показали, что после гидрирования содержание углерода в образце уменьшилось примерно в два раза. Предположительно, это уменьшение связано с деструкцией sp<sup>2</sup>-оболочки ультрадисперсных алмазов вследствие образования метана и/или других легких углеводородов, выделившихся из образца в процессе гидрирования.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 20-02-00638.

## Литература

1. S. A. Lermontov et al., Russ. J. Inorg. Chem., **65**, 255, 2020
2. Y. Inamura et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 015501, 2004

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ АНИЗОТРОПНЫХ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ**

Корсакова С. А., Насыров А. Д. и Крючков Н.П.  
*МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия*  
*sofia.korsakova@gmail.com, kryuchkov\_nkt@mail.ru*

Исследование динамики анизотропных частиц различной природы, особенно под действием внешних полей, является интересной и актуальной задачей из-за их широкого распространения в природе. Анизотропную форму, в частности форму микростержней, имеют многие биологические объекты, такие, как бактерии, живые клетки растений и животных, другие микроорганизмы (например, простейшие), поэтому понимание особенностей динамики и коллективного поведения таких объектов не только решает фундаментальные задачи, но и открывает перспективы практического применения для современных биотехнологий, тканевой инженерии, новых методов биопринтинга. Большой практический интерес [1] представляет исследование динамики анизотропных частиц во внешних электрических [2]-[4] и магнитных [5], [6] полях, которые позволяют управлять межчастичным взаимодействием и режимами движения таких частиц, что также актуально для применений в биоинжиниринге.

В настоящей работе предложена математическая модель системы, образованной вытянутыми коллоидными частицами (как одинаковыми, так и различными их смесями), находящимися во внешнем вращающемся электрическом поле. В предложенной модели динамика отдельных частиц вычисляется при помощи передемпфированного уравнения Ланжевена, в то время как межчастичные силы взаимодействия, моменты сил, а также моменты сил взаимодействия частиц с внешним полем рассчитываются на каждом шагу моделирования при помощи усреднения соответствующих взаимодействий в рамках модели

самосогласованных диполей по круговому или эллиптическому годографу внешнего электрического поля.

Проведены систематические расчеты динамики системы вытянутых коллоидных частиц во внешних вращающихся полях в широком диапазоне параметров системы. Установлено, что система может демонстрировать широкое разнообразие динамических режимов, включая: кристаллиты с выделенным (или без него) направлением ориентации палочек; кристаллиты с фиксированной сердцевинной (частицы только совершают небольшие колебания вблизи положений равновесия), но с наличием ярко выраженного течения на поверхности; кристаллиты, имеющие высокий уровень упорядоченности, но постоянно демонстрирующие локальную перестройку за счет поворота палочек и др. Пример раскадровки динамики представлен на Рис. 1.

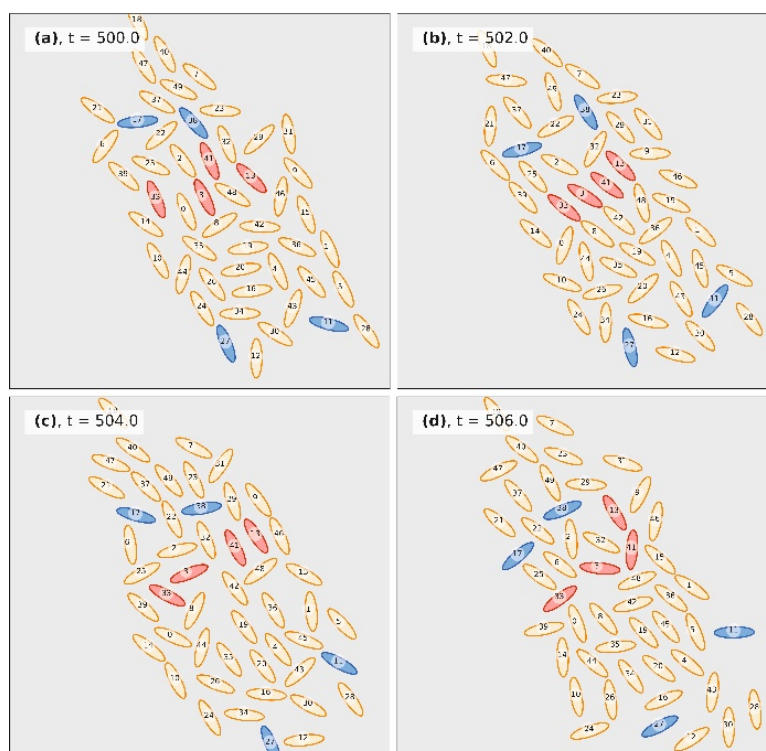


Рисунок 1. Раскадровка динамики анизотропных частиц

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

#### Литература

1. F. Ma et.al., *Anisotropic Particle Assemblies*, p. 131–165. Elsevier, **2018**

2. B. Liu et.al., Nat Commun **5**, 3092, 2014
3. B. Rupp et.al., Langmuir **34**, 7, 2497–2504, 2018
4. A. Azari et.al., Langmuir **33**, 48, 13834–13840, 2017
5. I. Martchenko et.al., Soft Matter **12**, 8755-8767, 2016
6. S. L. Biswal et.al., Phys. Rev. E **69**, 041406, 2004

## НОРМАЛЬНЫЙ И АНОМАЛЬНЫЙ ВКЛАДЫ В ЭФФЕКТ ХОЛЛА В ПАРАМАГНИТНОЙ ФАЗЕ $\text{Ho}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{V}_{12}$ С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ

Красиков К.М.<sup>1</sup>, Хорошилов А.Л.<sup>1</sup>, Глушков В.В.<sup>1</sup>, Демишев С.В.<sup>1</sup>,  
Краснорусский В.Н.<sup>2</sup>, Шицевалова Н.Ю.<sup>3</sup>, Филипов В.Б.<sup>3</sup>,  
Случанко Н.Е.<sup>1</sup>

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

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

<sup>3</sup>Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича ИАНУ

Обычно возникновение максимума коэффициента Холла  $R_H(T)$  в системах с тяжелыми фермионами связывают с переходом к когерентному режиму рассеяния носителей заряда [1-2]. Подобная особенность  $R_H(T)$  наблюдается как в чистом  $\text{LuV}_{12}$  [3], так и в твердых растворах замещения  $\text{Ho}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{V}_{12}$  с переходом в фазу каркасного стекла при  $T^* \sim 60\text{K}$  (см., например, кривую  $R_H(T)$  для направления внешнего магнитного поля  $\mathbf{H} \parallel [001]$  и  $\mathbf{H} \parallel [110]$  на рис. 1.

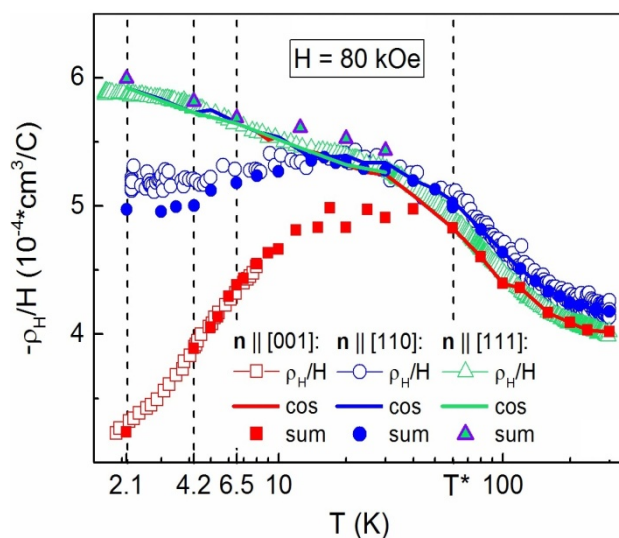


Рис.1 Температурная зависимость приведенного холловского сопротивления  $\rho_H(T)/H$  для направлений  $\mathbf{H} \parallel \mathbf{n} \parallel [001]$ ,  $[110]$  и  $[111]$  в  $\text{Ho}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{V}_{12}$ . Экспериментальные значения  $\rho_H/H$ , суммы  $= \rho_{H0}/H + \rho_{\text{Hан}}/H$  и приведенных амплитуд гармонического вклада  $\text{cos} = \rho_{H0}/H$  показаны соответственно открытыми, закрытыми символами и линиями.

С целью выяснения природы указанной холловской аномалии в работе в широком интервале температур  $T = (1.9-300)$  К в магнитном поле до  $80\text{кЭ}$  методом вращения образца были выполнены измерения удельного и холловского сопротивления для набора монокристаллических образцов  $\text{Ho}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{V}_{12}$  высокого качества с одинаковыми токовыми ориентациями  $\mathbf{J} \parallel [110]$ , но разными нормальными к образцам ( $\mathbf{H} \parallel \mathbf{n} \parallel [001], [110], [111]$  и  $[112]$ ).

Полученные в результате анализа кривые нормированного холловского сопротивления приведены на рис.2.

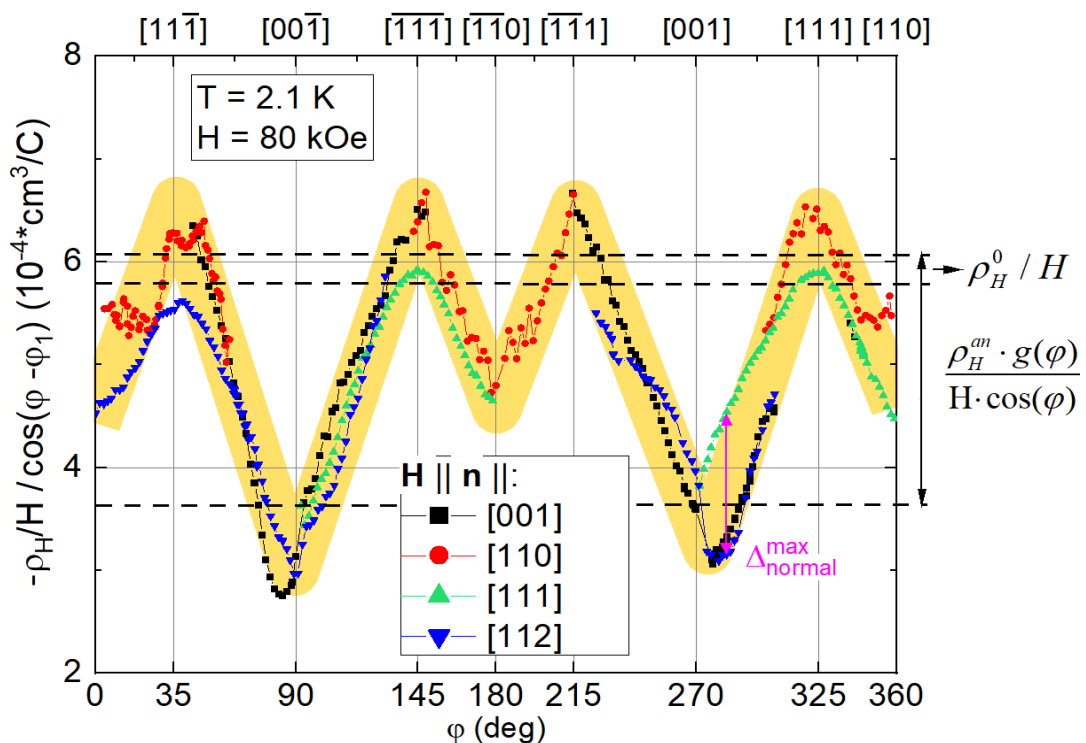


Рис.2 Нормированная угловая зависимость холловского сопротивления  $\rho_H(\varphi)/(H \cdot \cos(\varphi + \varphi_N))$  для 4-ёх образцов с разными нормальными к поверхности. Желтая заливка указывает на общую область для всех направлений и определяет аномальную анизотропную компоненту.

Измерения угловых кривых холловского сопротивления и магнетосопротивления при вращении вектора  $\mathbf{H}$  в плоскости  $(110)$ , перпендикулярной направлению страйпов в системе, позволили восстановить угловую зависимость аномального анизотропного положительного вклада, связанного с рассеянием носителей заряда на динамических зарядовых страйпах.

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

### Литература

1. M. Hadzic-Leroux et al., Europhys. Lett., **1**(11), p. 579, **1986**
2. P. Coleman et al, Phys. Rev. Lett. **55**, N.4, **1985**
3. N. Sluchanko et al., Phys. Rev. B **103**, 035117, **2021**

## МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА RhMnFeCoGe<sub>4</sub> (B20)

Цвященко А.В.<sup>1</sup>, Краснорусский В.Н.<sup>1</sup>, Боков А.В.<sup>1</sup>, Сидоров В.А.<sup>1</sup>,  
Саламатин Д.А.<sup>1</sup>, Семенов А.В.<sup>1,2</sup>, Бражкин В.В.<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Институт общей физики им А.М. Прохорова, РАН

*krasnorusky@mail.ru*

В широком диапазоне магнитных полей  $H < 90$  кЭ и температур  $2 < T < 400$  К изучена намагниченность высокоэнтропийного сплава (ВЭС) RhMnFeCoGe<sub>4</sub>, синтезированного при высоком давлении [1] в кристаллической структуре типа B20 без центра инверсии. Измерения проводились на вибрационном магнитометре VSM установки PPMS, производства Quantum Design (США).

Элементарная ячейка (э.я.) структуры B20 кубическая и содержит четыре атома металла и четыре металлоида (Si, Ge). Элементарная ячейка ВЭС RhMnFeCoGe<sub>4</sub> содержит 4 разных атома металла.

Магнитная восприимчивость  $\chi(T)$  в поле  $H = 100$  Э при уменьшении  $T$  показывает резкий рост при  $T \sim 150$  К. Увеличение поля  $H$  до 10 кЭ приводит к довольно резкому уменьшению этого подъема, дальнейший рост  $H$  приводит к более плавному ее уменьшению (Рис. 1).



Зависимость  $\chi^{-1}(T)$  демонстрирует линейное поведение в диапазоне 270 - 400 К со следующими параметрами закона Кюри-Вейса:  $T_{CP} = 186$  К,  $C = 2.0$  Эрг К/(Гс моль), откуда эффективный магнитный момент в парамагнитной (ПМ) фазе составляет  $4.0 \mu_B$  на каждую э.я. В тоже время в упорядоченной фазе при  $T = 2.0$  К в поле  $H = 90$  кЭ не наблюдается насыщения намагниченности ( $M$ ), полный момент э.я. при этом равен лишь  $3.1 \mu_B$ . Эти факты указывают на зонный характер электронов ответственных за магнетизм в  $RhMnFeCoGe_4$ .

При низких  $T < 20$  К в малых полях  $H < 500$  Э  $M(H)$  ведет себя практически линейно, что характерно для антиферромагнитного взаимодействия. На  $M(H)$  при  $T = 2$  К гистерезиса нет.

Даже в больших полях ( $H > 40$  кЭ) построение Белова-Аррота нелинейно. Модифицированное построение Аррота [2], найденное итерационным методом [3], спрямляет поведение  $M(H)$  вблизи  $T$  перехода  $T_C = 146$  К, а также позволяет определить критические индексы  $\beta = 0.34$

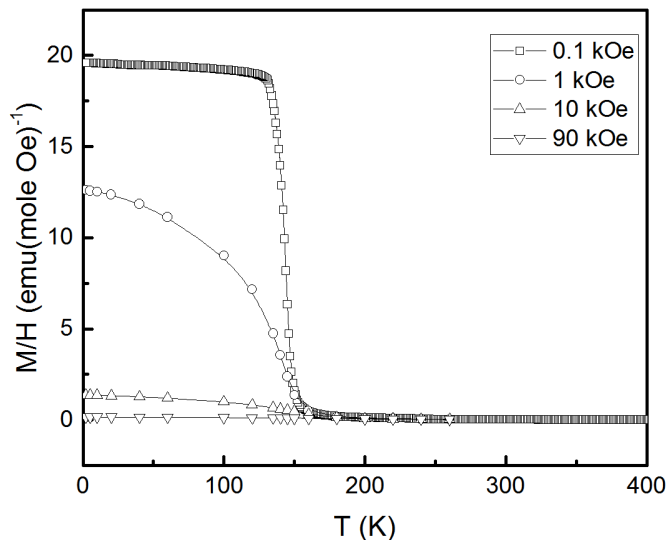


Рис. 1. Зависимости  $\chi(T)$  ВЭС  $RhMnFeCoGe_4$ , измеренные в полях 100 Э, 1 кЭ, 10 кЭ и 90 кЭ. Экспериментальные данные – точки, линии – ориентир для глаза.

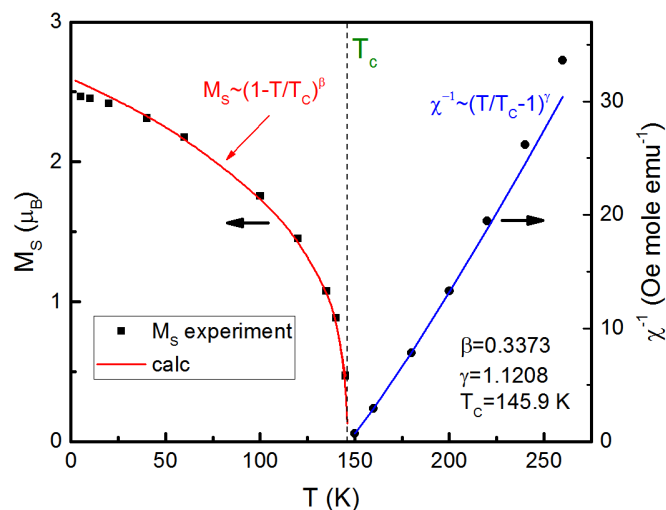


Рис. 2. Температурная зависимость спонтанной намагниченности  $M_S$  (точки, левая шкала) и начальная обратная восприимчивость  $\chi_0^{-1}(T)$  (точки, правая шкала) ВЭС  $RhMnFeCoGe_4$ . Сплошные линии - параметрические зависимости со значениями  $\beta = 0.337$ ,  $\gamma = 1.121$ ,  $T_C = 145.9$  К.

и  $\gamma = 1.12$ , которые хорошо описывают поведение спин-поляризованного состояния образца в больших полях  $H$  вблизи  $T_C$  (Рис.2). Также был определен параметр  $\delta = 4.32$ , описывающий поведение  $M(H)$  вблизи  $T_C$ . Таким образом, класс универсальности  $\text{RhMnFeCoGe}_4$  близок к трехмерной ферромагнитной модели Изинга ( $\beta = 0.325$ ,  $\gamma = 1.24$ ,  $\delta = 4.82$ ) [2], что указывает на небольшую одноосную анизотропию в ВЭС. Кроме этого линейный участок  $\chi_0^{-1}(T)$  дает момент э.я. в ПМ фазе  $\mu_{\text{eff}} = 4.76 \mu_B$ .

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 22-12-00008.

### Литература

1. A.V. Tsvyashchenko et al. in book of Abstracts DMI-2021, p. 38
2. L. Zhang, et al. Phys. Rev. B, **91**,0244403, **2015**
3. M. Chattopadhyay, et al. J. Phys.: Cond.Matt., **21**, 296003, **2009**

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ АНИЗОТРОПНЫХ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ**

Крючков Н.П., Гурский К.Д., Насыров А.Д., Юрченко С.О.  
*МГТУ им. Н. Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия*  
*kruchkov\_nkt@mail.ru*

Системы самодвижущихся или активных частиц могут демонстрировать сложные динамические режимы [1], недоступные обычным неактивным частицам. Такие режимы возникают благодаря нересипрокальным эффективным взаимодействиям [2,3] между частицами (для которых не выполняется третий закон Ньютона) или из-за сложного внутреннего неравновесного строения. Для таких динамических режимов характерна мультстабильность [2,3] – когда одним и тем же параметрам системы могут соответствовать несколько устойчивых состояний, кроме того, при определенных условиях такие состояния способны спонтанно трансформироваться друг в друга.

В настоящей работе систематически изучена динамика самодвижущихся (активных) частиц, описанных в работах [1,4,5].

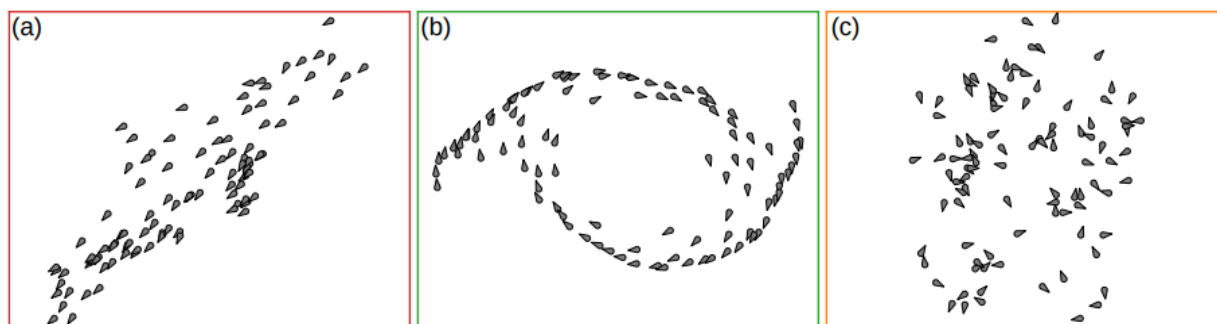


Рис. 1 Снимки конфигураций системы в трех устойчивых динамических режимах: (a) schooling, (b) milling, (c) swarming.

Данная система частиц может демонстрировать три устойчивых динамических режима: (a) schooling – направления агентов сильно синхронизовано и все они движутся в одну сторону, (b) milling – агенты формируют кольцо и движутся в нем по кругу (c) swarming – агенты формируют кластер без какого-либо упорядоченного движения внутри него. Примеры соответствующих типов динамики представлены на Рис.1.

В результате расчетов была построена фазовая диаграмма исследуемой системы, выявлены области мультистабильности и рассчитаны вероятности реализаций различных динамических режимов в этих областях.

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

#### Литература

1. A. Filella et.al. PRL, 120, 198101, **2018**
2. N.P. Kryuchkov et.al. PRE, 101, 063205, **2020**
3. N.P. Kryuchkov et.al. Soft Matter, 14, 9720, **2018**
4. J. Gautrais et.al. PLoS Comput. Biol., 8, e1002678, **2012**
5. D. S. Calovi et.al. New J. Phys., 16, 015026, **2014**

## КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ В 2D КОЛЛОИДНЫХ ЖИДКОСТЯХ ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Кушнир И.А., Крючков Н.П., Яковлев Е.В., Юрченко С.О.  
МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия  
*st.yurchenko@mail.ru*

Экспериментальные исследования в жидкостях существенным образом ограничены из-за технической невозможности реализации наблюдения с разрешением отдельных частиц. Это заставляет прибегнуть к использованию модельных систем с управляемым взаимодействием, таких как коллоидные суспензии[1] и пылевая плазма[2].

В жидком состоянии, энергия взаимодействия много больше кинетической энергии (как в кристалле), но отсутствует решетка и частицы диффундируют в системе (как в газе). Оба параметра малости (как и теория возмущений) оказываются неприменимы и принципиально важную роль начинает играть развитый ангармонизм в динамике жидкостей, определяющих их наблюдаемые свойства. Температура и давление меняют режимы взаимодействия и динамику движения частиц, что влияет на коллективные флуктуации, напрямую связанные с термодинамическими свойствами жидкостей[3]. В этой связи остается открытым вопрос: Каким образом дальное действие притяжения между частицами влияет на транспортные свойства (диффузию, вязкость) в жидкостях?

В настоящей работе при помощи двумерной системы коллоидных суспензий в электрических вращающихся полях исследовалось температурная зависимость коэффициента диффузии в диапазоне от тройной до критической точки. Экспериментальная установка и методика, использованная в настоящей работе, описана в работе [4]. В результате работы, построены экспериментальные температурные зависимости коэффициента диффузии.

Установлено, что в диапазоне от тройной до критической точки на линии бинодали диффузия линейным образом растет с температурой, отношение коэффициента диффузии конденсированных частиц вблизи линии кристаллизации к коэффициенту диффузии уединённых газовых частиц рано 0.11, что в целом соотносится с известной диффузионной универсалью[5].

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 20-12-00356 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Литература:

1. A.Kasper et al., Langmuir, **14**, 88, 5004-5010, **1998**
2. T.E.Sheridan, Phys. Scr., **91**, 9, 095603, **2016**
3. K. Trachenko et al., Rep. Progr. Phys. 79, 016502, **2016**.
4. E. V.Yakovlev et al. Sci. Rep., **7**,1,13727, **2017**
5. H. Lowen, et al., Phys. Rev. Let., **70**, 10, 1557-1560, **1993**

## **ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ ИЗВЛЕЧЕНИЯ ЛИТИЯ ИЗ БЕДНЫХ РАССОЛОВ**

Ланкин А. В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, <sup>2</sup>МФТИ(НИУ)  
*alex198508@yandex.ru*

Постоянное расширение области применения литиевых аккумуляторов делает литий всё более важным видом сырья, имеющего критическое значения для всё больших областей техники. Литий относится к редким и рассеянным элементам с ограниченными ресурсами. По крайней мере 2/3 его ресурсов связано с различными природными рассолами такими как рапы соленых озер и подземные минерализованные воды.

Классическая технология извлечения лития из рассолов включает в себя стадии упаривания природного рассола вплоть до выпадения из него в виде осадка основной части сопутствующих солей натрия, калия и магния, с последующим осаждением из остаточной рапы лития. Экономически эффективное упаривание растворов возможно только в регионах с аридным климатом. Кроме того, данный метод позволяет извлекать литий только при условии, если соотношение концентраций магния к литию меньше 6.

Альтернативный подход использует осаждение лития в виде ДГАЛ-С1 ( $\text{LiCl}(2,5-3,0)\text{Al}(\text{OH})_3(2-4)\text{H}_2\text{O}$ ). Такой подход позволяет работа с сырьём, содержащим существенно большие концентрации магния в рассоле.

Наиболее привлекательными при переработке бедных рассолов с высоким содержанием магния являются подходы, которые не требуют ни предварительного концентрирования растворов путём упаривания, ни предварительного извлечения магния, позволяя

извлекать литий напрямую из добываемого рассола. Сейчас существует три класса таких перспективных технологий.

Первой группой технологий, позволяющих напрямую извлекать литий из бедных рассолов, является его экстракция растворами хлорида железа совместно с ТБФ в органических растворителях. Альтернативой смеси хлорида железа и ТБФ при экстракции могут быть селективно связывающиеся с литием краун-эфиры.

Второй группой технологий прямого извлечения лития является его абсорбция на неорганических абсорбентах. Наиболее перспективными такими абсорбентами являются оксид марганца и гидратированный оксид титана. Оба абсорбента имеют исключительно высокую селективность по отношению к литию. Однако, стабильность оксидов марганца в водных растворах недостаточна. Титановый абсорбент обладает существенно лучшей стабильностью, но недостаточной абсорбционной ёмкостью и скоростью абсорбции.

Третья группа технологий основана на применение мембран селективно-проницаемых для лития и непроницаемых для других ионов в процессах обратного осмоса или электродиализа. Ключевой проблемой развития данного направления является создание новых материалов мембран с высокой селективностью по отношению к литию. Существующие сейчас полимерные материалы пока имеют недостаточную селективность. В связи с этим перспективным тут представляется направление создания “жидких мембран”, т.е. промежуточного слоя органической жидкости, через который идёт перенос ионов в процессе электродиализа. Если в полимерной мембране могут присутствовать макроскопические поры, наличие которых снижает селективность, то в слое жидкости их заведомо не может быть. Это позволяет потенциально получать селективность “жидких мембран” существенно больше, чем при использовании твердых. Органическая жидкость “жидких мембран” может представлять собой растворы краун-эфиров в несмешивающихся с водой ионных жидкостях.

В докладе будет сделан обзор различных технологий извлечения лития из природных рассолов и рассмотрено место молекулярно-динамического моделирования для их усовершенствования и поиска новых подходов к извлечению этого дефицитного вида сырья.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (18-19-00734).

# РЕГУЛИРУЕМАЯ КОЛЛОИДНАЯ САМОСБОРКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТРЁХМЕРНЫХ КОНИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

Либет П. А., Широкова А. А., Симкин И. В., Яковлев Е.В.  
и Юрченко С.О.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, 105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5  
libetpa@gmail.com, yakov.egor@gmail.com, st.yurchenko@mail.ru*

Системы с регулируемыми взаимодействиями [1] во внешних электрических [2] и магнитных [3] полях представляют собой перспективный класс модельных систем, важных для фундаментальных и прикладных исследований. Особый интерес представляет образование конденсированных фаз из коллоидных суспензий в прецессирующем многоосном магнитном поле [4, 5]. Трёхмерное вращающееся магнитное поле является перспективным инструментом для аддитивных технологий, трёхмерной печати и для получения новых материалов. Варьируя угол прецессии трёхмерных конических полей, возможно получать различные коллоидные структуры. Учитывая эти факты, мы провели численное моделирование многоосного вращающегося магнитного поля и разработали экспериментальную установку (Рис. 1) для изучения динамики коллоидных и живых систем в трёхмерном магнитном поле, при различных углах прецессии вектора магнитной индукции.

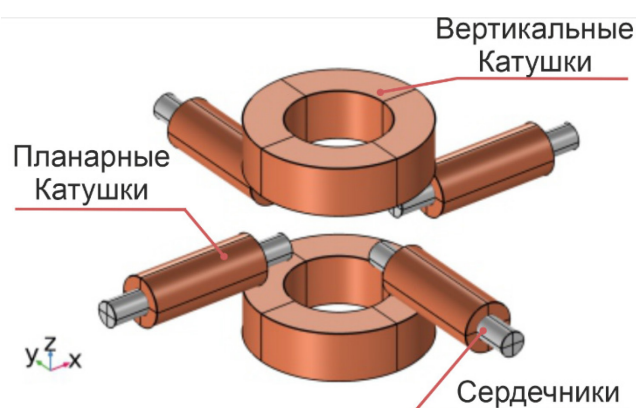


Рис. 1. Схематическое изображение экспериментальной установки

Нами ставилась цель получить магнитное поле с напряженностью порядка  $H \approx 100$  Э и однородностью 99% в квадратной области со стороной 2,5 мм. Кроме того, в связи с тем, что объектив микроскопа должен располагаться достаточно близко к исследуемому образцу, мы сконструировали каркас катушки, через центр которого проходит

объектив микроскопа. С помощью метода конечных элементов была построена численная модель экспериментальной установки и решены уравнения электромагнетизма с граничными условиями. В качестве пилотных экспериментов исследовалась система магнитных частиц диоксида кремния размером 2,47 мкм в деионизированной воде.

В результате, создав цифровой двойник экспериментальной установки, мы смогли спроектировать оптимальную геометрию и подобрать соответствующие параметры для вертикальных и планарных катушек. Проведя пилотные эксперименты, мы доказали возможность самосборки коллоидных структур в агрегаты. Экспериментальная система может быть использована для перспективных исследований в области адресной доставки лекарств, 3D-печати и других приложений в области коллоидной и живой материи.

Создание цифрового двойника и численное моделирование многоосного магнитного поля выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания в сфере научной деятельности № 0705-2021-0035.

Пилотные эксперименты и сборка экспериментальной установки выполнены при поддержке Российского Научного Фонда, грант № 19-12-00092.

#### Литература

1. Cai Z. et al. From colloidal particles to photonic crystals: Advances in self-assembly and their emerging applications //Chemical Society Reviews. – **2021**. – Т. 50. – №. 10. – С. 5898-5951.
2. Yakovlev E. V. et al. 2D colloids in rotating electric fields: A laboratory of strong tunable three-body interactions //Journal of Colloid and Interface Science. – **2022**. – Т. 608. – С. 564-574.
3. Elismaili M. et al. Rotation dynamics and internal structure of self-assembled binary paramagnetic colloidal clusters //The Journal of Chemical Physics. – **2021**. – Т. 155. – №. 15. – С. 154902.
4. Coughlan A. C. H., Bevan M. A. Effective colloidal interactions in rotating magnetic fields //The Journal of chemical physics. – **2017**. – Т. 147. – №. 7. – С. 074903.
5. Solis K. J., Martin J. E. Chevrons, filaments, spinning clusters and phase coexistence: emergent dynamics of 2-and 3-d particle suspensions driven by multiaxial magnetic fields //Soft matter. – **2017**. – Т. 13. – №. 34. – С. 5676-5683.



# ОБРАЗОВАНИЕ, ДИФФУЗИЯ И РОСТ ГАЗОНАПОЛНЕННЫХ ПУЗЫРЬКОВ В ГАММА-УРАНЕ ПРИ ИЗБЫТКЕ МЕЖДОУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ: СВЯЗЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И КИНЕТИКИ

Е.А. Лобашев<sup>1,2</sup>, А.С. Антропов<sup>1,2</sup>, В.В. Стегайлов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединённый институт высоких температур РАН  
*lobashev.ea@phystech.edu*

Образование пузырьков из продуктов деления в ядерном топливе может привести к его распуханию, поэтому расчет скорости их формирования и диффузии является одной из важных подзадач для построения комплексных численных моделей ядерных реакторов. В работе исследуется формирование пузырей из отдельных атомов ксенона в решётке гамма-урана. В отличие от большинства металлов, диффузионные процессы в нем определяются не вакансиями, а междоузельными атомами. Применяется метод классической молекулярной динамики с использованием потенциала ЕАМ [1].

Определены зависимости коэффициента диффузии, а также количества атомов ксенона от радиуса, при различных концентрациях точечных дефектов в решётке. Построена система кинетических уравнений, позволяющих определить распределение пузырьков по размерам в различные моменты времени на основе [2], и найдено численное решение этой системы.

## Литература

1. D.E. Smirnova, A.Y. Kuksin, S.V. Starikov, V.V. Stegailov, Z. Insepov, J. Rest, and A.M. Yacout, *Mod. and Sim. in Mat. Sc. and Eng.*, **21(3)**, 035011, **2013**
2. S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.*, **15**, 59–62, **1943**

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХЛОРСОДЕРЖАЩЕГО ДВОЙНОГО ГИДРОКСИДА АЛЮМИНИЯ И ЛИТИЯ

Лукьянчук В. Г.<sup>1,2</sup>, Ланкин А. В.<sup>1,2</sup>, Норман Г.Э.<sup>1,2,3</sup>  
<sup>1</sup>МФТИ(НИУ), <sup>2</sup>ОИВТ РАН, <sup>3</sup>НИУ ВШЭ  
*lukianchuk.vg@phystech.edu*

Гидроксид алюминия имеет множество применений, среди которых выделяется способность сорбировать различные вещества из воды. Форма хлорсодержащего двойного гидроксида алюминия и лития (ДГАЛ-Cl) способна к обратимой сорбции лития из воды, содержащей его соли [1], что позволяет его использовать для извлечения лития из геотермальных вод.

Этот метод добычи лития имеет ряд существенных преимуществ, к которым относятся высокая селективность над побочными ионами такими как ионы магния, натрия и кальция, низкая стоимость и отсутствие токсичных выбросов [2]. Однако относительно низкая устойчивость ДГАЛ-Cl не позволяет на данный момент применить это вещество в промышленности [1]. Тем не менее, Wu L. et al. [3] показали, что допирование ионами железа повышает термодинамическую стабильность ДГАЛ-Cl, что говорит о возможности дальнейшей модификации структуры вещества для повышения эффективности процесса сорбции лития, в чём может помочь метод молекулярной динамики.

Квантово-механические расчеты методом функционала электронной плотности достаточно хорошо себя показывают при моделировании двойных слоистых гидроксидов [4]. Но практическая возможность их использования при моделировании интерполяции лития в структуру гидроксида алюминия из водных растворов ограничена высокими вычислительными затратами при использовании *ab initio* молекулярной динамики. Моделирование данного процесса может быть выполнено в рамках классического метода молекулярной динамики, что требует существенно меньших вычислительных затрат. Однако, расчеты методом классической молекулярной динамики для ДГАЛ-Cl были крайне затруднены из-за отсутствия подходящего потенциала [5]. Это создает потребность в поиске потенциалов, позволяющих достаточно точно моделировать данный процесс.

В данной работе было проведено молекулярно-динамическое моделирование ДГАЛ-Cl с использованием программного пакета

LAMMPS. Для моделирования был использован модифицированный потенциал ClayFF [6], в котором были изменены эффективные заряды атомов. Для вычисления новых эффективных зарядов был использован алгоритм DDEC6, реализованный в программном пакете Chargemol Program [7]. Квантово-механические расчеты для оптимизации положений атомов и расчета электронной плотности проводились в Quantum Espresso [8].

В результате полученная молекулярно-динамическая модель соответствует экспериментальной и сохраняется с течением времени. Также в модели непосредственно наблюдается интеркаляция ионов лития, что говорит о ее применимости для дальнейшего изучения путей модификации ДГАЛ-С1.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ (18-19-00734).

#### Литература

1. M.P. Paranthaman et al., Environ Sci Technol., **51**, 13481, **2017**
2. F. Li, X. Duan, Structure and Bonding, **119**, 193, **2006**
3. L. Wu et al., JACerS, **102**, 2398, **2019**
4. D.G. Costa et al., J. Phys. Chem. C, **114**, 14133, **2010**
5. G.M. Lombardo et al., Eur. J. Inorg. Chem., **24**, 5026, **2005**
6. R.T. Cygan, J.J. Liang, A.G. Kalinichev, J. Phys. Chem. B, **108**, 1255, **2004**
7. T.A. Manz, N.G. Limas, RSC Adv., **6**, 47771, **2016**
8. P. Giannozzi et al., J. Phys. Condens. Matter, **21**, 395502, **2009**

### **СИНТЕЗИРОВАННЫЕ ПОД ДАВЛЕНИЕМ СОЕДИНЕНИЯ 3d-МЕТАЛЛОВ С РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ И ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ**

Магницкая М. В.<sup>1</sup>, Боков А. В.<sup>1</sup>, Саламатин Д. А.<sup>1</sup>,  
Щелкачев Н. М.<sup>1</sup>, Крылов В. И.<sup>2</sup>, Цвященко А. В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики высоких давлений РАН, Москва, Троицк

<sup>2</sup>Институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, МГУ, Москва  
*magnita@yandex.ru*

Топологически плотноупакованные фазы Лавеса с общей химической формулой  $AB_2$  широко распространенный класс интерметаллидов. Материалы на их основе используются для хранения водорода, как магнитомеханические датчики, а также в

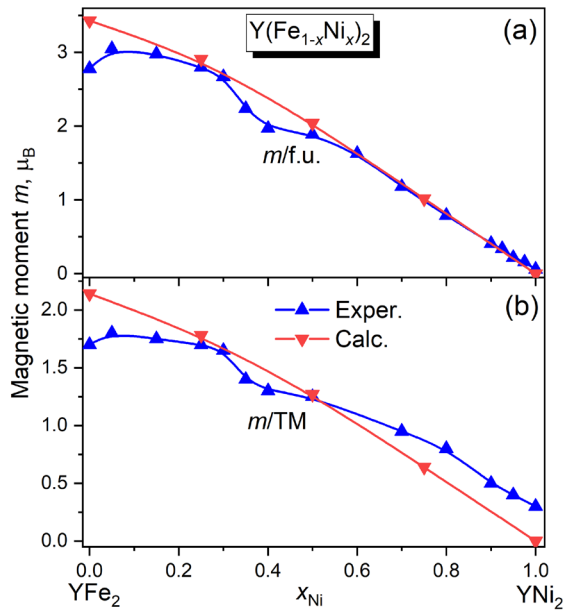


Рис. 1. Красным и синим цветом показаны экспериментальный и теоретический магнитный момент  $m(x)$  для  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  на формульную единицу (а) и на атом переходного металла (б).

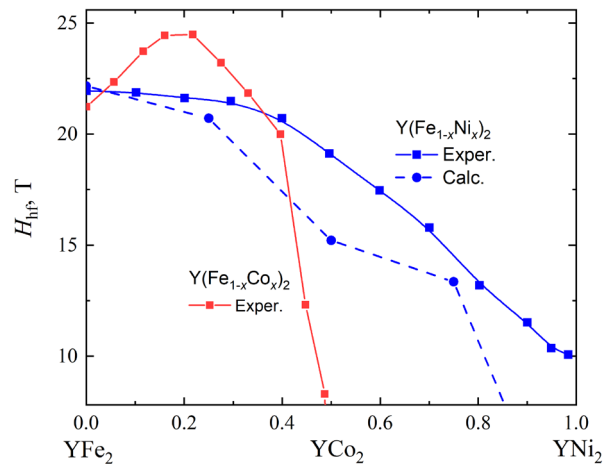


Рис. 2. Сверхтонкое магнитное поле  $H_{hf}$  на ядре железа как функция концентрации Ni или Co ( $x$ ). Синим и красным цветом показаны результаты измерений для  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  и  $Y(Fe_{1-x}Co_x)_2$ . Штриховая линия – расчет для  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ .

качестве коррозионно- и износостойких покрытий в агрессивных средах и при высоких температурах [1].

В настоящей работе представлено теоретическое и экспериментальное исследование магнитных свойств и сверхтонких взаимодействий в соединениях на основе фаз Лавеса  $R(T1_{1-x}T2_x)_2$ , где  $R$  — щелочноземельный или редкоземельный элемент, а  $T = Fe, Co, Ni$ . Несколько непрерывных рядов  $R(T1_{1-x}T2_x)_2$  были синтезированы под давлением до 8 ГПа в широком диапазоне концентраций  $0 \leq x \leq 1$  (метод синтеза см., например, в [2]). Показано, что все полученные фазы кристаллизуются в кубической структуре типа MgCu<sub>2</sub> (C15). Отметим, что часть из них образуются при нормальных условиях, в то время как некоторые другие — только при высоких давлениях и температурах, характерных для недр Земли.

Нами были выполнены экспериментальные измерения эффекта Мёссбауэра на ядре  $^{57}Fe$ . Первопринципные расчеты проводились на основе теории функционала плотности с помощью пакета Wien2k [2]. На рис. 1 представлены концентрационные зависимости магнитного момента для  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ ; на рис. 2 — сверхтонкое поле на ядре Fe для

$Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  и  $Y(Fe_{1-x}Co_x)_2$ . Вычисленные магнитные моменты и сверхтонкие магнитные поля в целом согласуются с экспериментом.

Некоторые из рассматриваемых соединений не удалось синтезировать при умеренных давлениях в диапазоне до 8 ГПа. Простые эмпирические предположения, учитывающие упорядочение материалов в «химическом пространстве» по атомным свойствам (размер, электроотрицательность и т.д.), позволяют предположить, что для их образования требуются более высокие давления.

Для теоретического предсказания диапазонов давлений, в которых данные соединения устойчивы относительно разложения на компоненты, использовался эффективный подход, существенно упрощающий эту задачу: эволюционный поиск энергетически выгодных фаз с помощью кода USPEX [3].

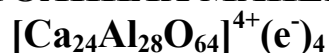
Синтез при высоких давлениях новых железосодержащих соединений и их изучение позволит расширить класс систем, перспективных для современных технологических приложений. Эти исследования тесно связаны также с проблемой строения и химического состава земного ядра, с построением его тепловых, магнитных и динамических моделей.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-22-00806.

#### Литература

1. F. Stein, A. Leineweber, *J. Mater. Sci.*, **56**, 5321–5427, **2021**
2. A.V. Tsvyashchenko *et al.*, *Solid State Phenom.*, **190**, 225–228, **2012**
3. P. Blaha *et al.*, *J. Chem. Phys.*, **152**, 074101, **2020**
4. A.R. Oganov, C.W. Glass, *J. Chem. Phys.*, **124**, 244704, **2006**

## ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ НА ЭЛЕКТРИДНЫХ СОСТОЯНИЯХ МАЙЕНИТА



Мазанникова М. А.<sup>1,2</sup>, Новоселов Д. Ю.<sup>1,2</sup>, Коротин Д. М.<sup>1</sup>,  
Анисимов В. И.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

<sup>2</sup>*Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*

*mazannikova@imp.uran.ru*

Электриды представляют собой новый класс материалов, которые содержат почти-свободные электроны, локализующиеся в

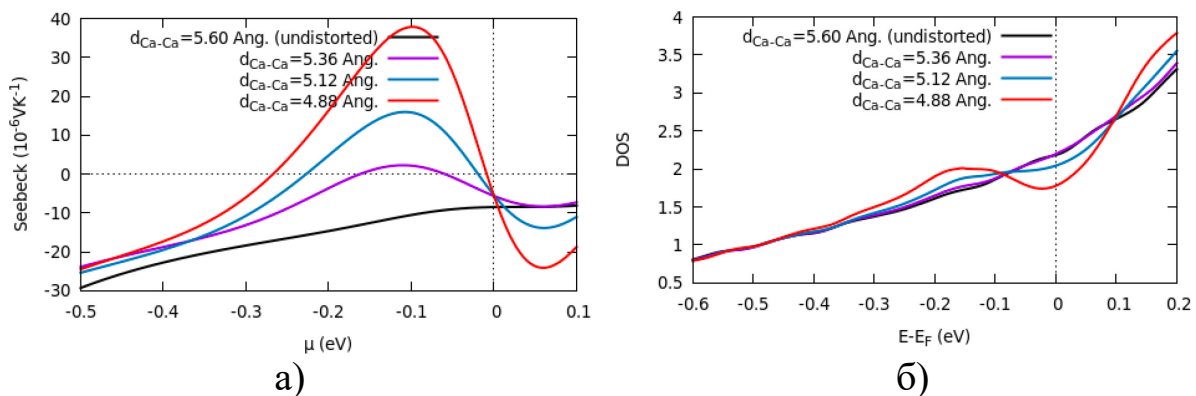


Рисунок 1. а) Коэффициент Зеебека и б) Плотность состояний для структур с различной длиной связи между аксиальными атомами кальция одного из кейджей.

периодически расположенных пустотах кристаллов. Минерал Майенит  $[\text{Ca}_{24}\text{Al}_{28}\text{O}_{64}]^{4+}(\text{e}^-)_4$  наиболее известен как первый неорганический электрид [1], демонстрирующий ряд необычных свойств и обладающий потенциалом практического применения, в том числе, в качестве катализатора [2]. Эксперименты по фотоэмиссионной спектроскопии высокого разрешения [3] показали, что в майените наблюдается выраженный пик под уровнем Ферми, в отличие от плотности электронных состояний, полученной из DFT. Кроме того, результаты DFT расчётов демонстрируют положительный наклон кривой плотности состояний вблизи  $E_F$ , что говорит об отрицательном знаке коэффициента Зеебека (знак носителя заряда), хотя в эксперименте [4] он положительный. Путём деформации одного из кейджей (кристаллическая полость) майенита мы воспроизводим частично локализованное металлическое состояние. Расстояние между двумя аксиальными атомами кальция на полюсах кейджа является параметром оценки величины искажения кейджа. Для описания электронных состояний были построены функций Ванье (ФВ), не связанные с узлами каркаса кристаллической решётки и локализованные в центрах междоузлий. Были рассчитаны электронные транспортные свойства электрида майенита путём решения полуклассических уравнений переноса Больцмана с использованием ФВ. Были получены зависимости коэффициента Зеебека от химического потенциала при  $T=300$  К для структур с различной степенью деформации. Расчёты показали, что коэффициент Зеебека в отсутствие искажений всегда отрицателен, в то время как сжатие кейджа меняет его знак (Рис. 1а). Из графика

плотности состояний (Рис. 1б) видна тенденция к образованию пика под уровнем Ферми, усиливающаяся с увеличением искажения.

Таким образом, установлено, что локализация электридных электронов в отдельных кристаллических пустотах, сопровождаемая деформацией последних, может приводить к изменению знака коэффициента Зеебека с «-» на «+» в  $[\text{Ca}_{24}\text{Al}_{28}\text{O}_{64}]^{4+}(\text{e}^-)_4$ , указывая на поляронный тип проводимости майенита в электридной фазе.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 19-12-00012.

### Литература

1. Kim S. W., Hosono H., Synthesis and properties of  $12\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3$  electride: review of single crystal and thin film growth, *Philosophical Magazine*, **92**, 19-21, **2012**
2. Karim Khan, Ayesha Khan Tareen, Muhammad Aslam et al., A comprehensive review on synthesis of pristine and doped inorganic room temperature stable mayenite electride,  $[\text{Ca}_{24}\text{Al}_{28}\text{O}_{64}]^{4+}(\text{e}^-)_4$  and its applications as a catalyst, *Progress in Solid State Chemistry*, **54**, 1-19 **1971**
3. S. Souma, T. Arakane, T. Sato, T. Takahashi, S. Wng Kim, S. Matsuishi, and H. Hosono, Direct Evidence for Cage Conduction Band in Superconducting Cement  $12\text{CaO}\cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$  by Low-Energy High-Resolution Photoemission Spectroscopy, *Journal of the Physical Society of Japan* **79**, 103704, **2010**
4. Kim S. W., Ryuichi T, Thermal conductivity and Seebeck coefficient of  $12\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3$  electride with a cage structure, *Physical Review B*, **80**, 075201, **2009**

## **ВЛИЯНИЕ ТЕРМОБАРИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА БИНАРНЫХ И МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ АІ-ПМ-РЗМ, ВКЛЮЧАЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ, ПРИ БЫСТРОМ ОХЛАЖДЕНИИ ИХ РАСПЛАВОВ**

Меньшикова С. Г.<sup>1</sup>, Бражкин В. В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>УдмФИЦ УрО РАН, г.Ижевск, <sup>2</sup>ИФВД РАН, г.Москва, г.Троицк  
*svetlmenh@mail.ru*

Прогресс в понимании процессов структурообразования, протекающих в расплавах типа АІ-ПМ-РЗМ (ПМ-переходный металл,

РЗМ-редкоземельный металл) (80-90 ат.% Al) в области эвтектики, а так же в изучении влияния экстремальных воздействий (высоких давления, температуры и скорости охлаждения) на процессы их затвердевания имеет высокую научную значимость и актуальность.

Цель работы-исследование возможности формирования новых фаз и изучение свойств сплавов на основе алюминия бинарных систем Al-ПМ (ПМ: Co/Ni), Al-РЗМ (РЗМ: Y/Gd), а также многокомпонентных сплавов  $Al_{87}Ni_8Y_5$ ,  $Al_{86}Ni_2Co_6Gd_6$ ,  $Al_{86}Ni_6Co_4Gd_2Tb_2$  и эквиатомного высокоэнтропийного сплава  $Al_{20}Ni_{20}Co_{20}Fe_{20}Cr_{20}$  при быстром затвердевании их высокотемпературных расплавов под высоким давлением.

Образцы получали в камере высокого давления типа «тороид». Температурный диапазон от ликвидуса до 2000 К, диапазон давлений от атмосферного до 10 ГПа. Схема эксперимента: установление давления→импульсный нагрев→выдержка при установленных давлении и температуре→быстрое охлаждение без сброса давления до комнатной температуры→уменьшение высокого давления до атмосферного. Скорость охлаждения ~ 1000 град/с.

При давлениях выше 7 ГПа и температурах порядка 1800 К в сплавах формируются новые метастабильные соединения, сохраняющиеся в течение длительного времени в нормальных условиях. В зависимости от режима получения меняются механизмы затвердевания расплавов, формируются аномально пересыщенные твердые растворы в сплавах. Образцы однородные, плотные, не обнаружено пор и усадочных раковин. Структура мелкодисперсная с высокими механическими свойствами.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 22-22-00674).

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ МНОГОЧАСТИЧНАЯ ЗАПУТАННОСТЬ

Михеенков А. В.<sup>1,2</sup>, Валиулин В.Э.<sup>1,2</sup>, Кугель К. И.<sup>3,4</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>*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН*

<sup>4</sup>*НИУ Высшая школа экономики,*

*mikheev@bk.ru*

Доклад является продолжением прошлогоднего и, как и в 2021 году, посвящен исследованию квантовой многочастичной



запутанности нетождественных степеней свободы. Изучаемая модель – та же, спин-псевдоспиновая [1,2], но теперь анализируется температурное поведение запутанности.

Итак, методом точной диагонализации изучается запутанность двух подсистем для конечной одномерной цепочки с гамильтонианом симметричной спин-орбитальной модели Кугеля-Хомского

$$H = J \sum S_i S_j + I \sum T_i T_j + K \sum (S_i S_j)(T_i T_j),$$

$S_i$  и  $T_i$  – операторы спина и псевдоспина ( $S=1/2$ ,  $T=1/2$ ), все суммы – по связям ближайших узлов.

При ненулевой температуре принятая для  $T=0$  мера запутанности Concurrence в многочастичных системах не является адекватной, в этом случае используются другие меры. В работе выбрана Logarithmic Negativity (у обоих терминов отсутствует принятый русский перевод). При  $T \rightarrow 0$  эти две меры сшиваются.

Отметим, что, так как все меры запутанности исходят из точной матрицы плотности (отвечающей основному состоянию или температурной), пересчитать одну в другую не составляет труда [3,4].

Глобальное правило температурного поведения запутанности ясно – с ростом  $T$  все корреляции ослабевают и запутанность (если она отлична от нуля при  $T = 0$ ) убывает. Однако, наряду с этой общей тенденцией, проявляются два интуитивно не очевидных эффекта.

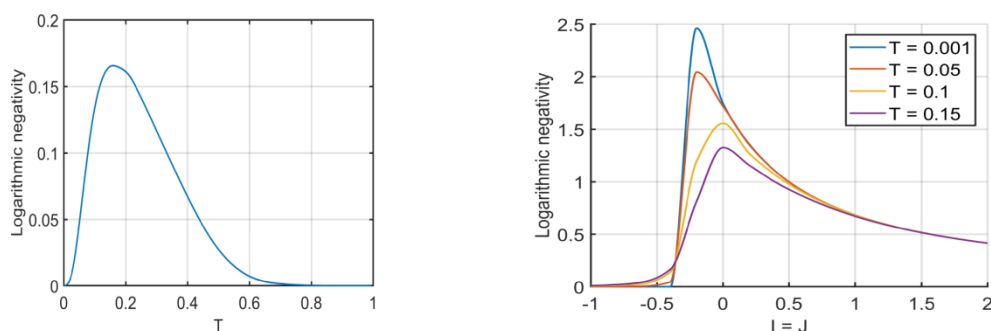


Рис. 1. Слева. Пример немонотонного по  $T$  поведения запутанности ( $I = J = -0.4$ ,  $K = -1$ ). Справа.  $T$ -эволюция запутанности вдоль главной диагонали  $I$ - $J$  плоскости ( $I = J$ ). Запутанность на «плече» гораздо менее чувствительна к температуре, чем вблизи максимума. Слева от максимума наблюдается немонотонность.

В некоторых областях параметров модели запутанность зависит от температуры немонотонно, то есть с ростом  $T$  сначала растет, проходит через максимум и лишь затем начинает убывать. Еще более интересно то, что при некоторых параметрах немонотонность «стартует» с нулевого значения, то есть при  $T = 0$  запутанность отсутствует. Пример такой температурной эволюции представлен на левой панели Рис.1.

Подобные эффекты проявлялись при анализе запутанности в двухчастичных системах. Объяснение, которое в этом случае можно получить аналитически, следующее. Основное состояние незапутанное, а одно или несколько нижних возбужденных – запутанные, их примешивание в температурную матрицу плотности и приводит к немонотонности. В многочастичном случае, вероятно, возникает аналогичный эффект, хотя надеяться на его аналитическое обоснование не приходится.

Второй нетривиальный результат – на некоторых участках пространства параметров запутанность оказывается чрезвычайно устойчивой к температуре, образуя «острова стабильности» (правая панель Рис.1). Часть результатов опубликована в [5].

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 18-12-00438.

## Литература

1. К.И.Кугель, Д.И.Хомский, УФН, **136**, 621, **1982**.
2. D. I. Khomskii, S. V. Streltsov, Chem. Rev., **121**, 2992, **2021**.
3. L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral, Rev. Mod. Phys., **80**, 517, **2008**.
4. R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki, Rev. Mod. Phys., **81**, 865, **2009**.
5. V. E. Valiulin, A. V. Mikheyenkov, N. M. Chtchelkatchev, K. I. Kugel, Phys. Rev. B, **102**, 155125, **2020**.

# МАГНИТНЫЕ КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ ВНУТРИСЛОЕВОЙ ПРОВОДИМОСТИ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ МЕТАЛЛАХ

Могилюк Т. И.<sup>1</sup>, Григорьев П. Д.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Россия, Москва, пл.  
Академика Курчатова, д. 1

<sup>2</sup>ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, 142432, МО., г. Черноголовка, просп.  
Академика Семенова, д. 1А

<sup>3</sup>НИТУ «МИСиС», 119049, Москва, Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1  
5taras@mail.ru

Мы находим выражения для холловской внутрислоевой проводимости в квазидвумерных металлах, описывающие её квантовые и медленные осцилляции в магнитном поле. С учётом ранее выведенных выражений для диагональной компоненты тензора проводимости [1], получены выражения для тензора магнетосопротивления. Данная работа наконец закрывает вопрос вычисления трёхмерного тензора магнетосопротивления вкуче с работами [1, 2].

В расчёте используется самосогласованное борновское приближение. Примеси считаются точечными и случайно разбросанными по объёму квазидвумерного металла. Для вычисления холловской проводимости применяется формула Смрчка-Стреды [3].

Вопрос вычисления магнитных квантовых и медленных осцилляций магнетосопротивления имеет большое практическое значение для анализа многочисленных экспериментов.

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

## Литература

1. T. I. Mogilyuk and P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B, **98**, 045118, **2018**
2. P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B, **67**, 144401, **2003**
3. P. Streda, J. Phys. C: Solid State Phys., **15**, L717, **1982**

## МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В РЕШЕНИИ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

Мокшин А.В.

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, г. Казань  
anatolii.mokshin@mail.ru*

Многие хорошо известные физические задачи считались и до сих пор считаются *нерешаемыми* по вполне понятным причинам. Так, например, имеющиеся исходные условия в этих задачах могут быть сформулированными очень широко, либо этих условий не совсем достаточно, чтобы получить решение стандартными математическими методами. Единственный способ найти решение в подобного рода задачах – это осуществление перебора возможных решений, что является очень трудоемким и поэтому совершенно не рассматривается в качестве подходящего метода.

С другой стороны, решения этих задач могут быть получены с помощью так называемых *методов машинного обучения*, к которым относятся методы нейронных сетей, эволюционных (генетических) алгоритмов и др. Хорошо известными физическими задачами, решения которых уже предлагались и были получены с помощью методов машинного обучения являются задачи на «предсказание» кристаллических фаз (при экстремальных давлениях, специфических условиях геометрии системы: квазидвумерные системы, системы в конфайнменте и т.д.). Кроме того, методы машинного обучения позволяют решать задачи, связанные с воссозданием эффективных потенциалов межчастичного взаимодействия по экспериментальным данным о структуре. Обсуждению этих и других результатов посвящен данный доклад.

Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «Базис» (проект № 20-1-2-38-1).

# ОБОБЩЕНИЕ ИНТЕРПОЛЯЦИОННОГО МЕТОДА КРАТЧАЙШИХ ГРАФОВ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПАРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ЖИДКОСТЯХ

А.Д.Насыров, Н.П.Крючков, Е.В.Яковлев, И.А.Кушнир, И.В.Симкин,  
С.О.Юрченко

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия*  
*nasyrovartur151998@gmail.com*

Описание свойств жидкости вблизи линии плавления актуальная задача современной физики конденсированного состояния [1]. С помощью интегральных уравнений Орнштейна-Цернике [2] и иерархии БГКИ [1] можно описывать простые жидкости, но их точность ограничена из-за использования приближенных замыкающих соотношений [3]. Ранее был разработан интерполяционный метод кратчайших графов (ИМ) для описания парных корреляций в кристаллах [4], корректность которого была проверена на МД симуляциях [4], коллоидных [5] и реальных кристаллах [6]. Целью настоящей работы является обобщение ИМ для его применения в жидкостях.

Были проведены моделирования  $NVT$  ансамбля из  $N = 2.56 \cdot 10^3$  частиц в при помощи пакета LAMMPS при потенциалах взаимодействия  $LJ12 - 6; IPLn, n = 3, 9, 12, 18$ ; в диапазоне температур  $T_{melt} - 50T_{melt}$ ,  $T_{melt}$ -температура плавления системы. Использовались нормированные величины  $T/\epsilon \rightarrow T$ , и временные шаги  $\delta t = 7.4 \times 10^{-4} \sqrt{m \sigma^2 / \epsilon}$ . Для дополнения МД, проведены

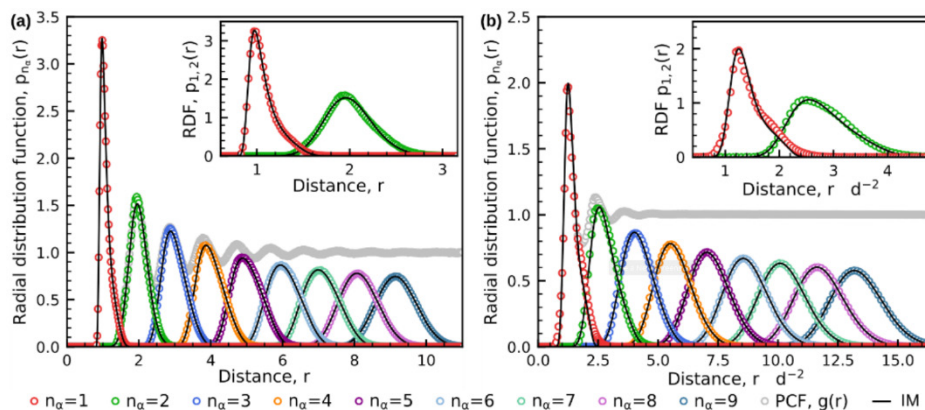


Рис.1 Корреляционные пики полученные с помощью МД и экспериментов. Цветные символы показывают вклад корреляционных сфер, серым цветом изображена корреляционная функция  $g(r)$ , сплошная черная линия - результат, полученный с помощью ИМ

эксперименты с коллоидными частицами во внешних вращающихся электрических полях. Взаимодействие частиц осуществляется по потенциалу Юкавы, технические детали экспериментов аналогичны работам [5]

Результаты полученные в ходе обработки МД и экспериментов с коллоидными частицами показаны на Рис.(1, а, b) соответственно. Видно, что корреляционная функция в 2D жидкостях может быть разбита на радиальные составляющие (корреляционные пики) соответствующие определенным корреляционным сферам. ИМ дает точные результаты по описанию парных корреляций, как на ближних, так и на дальних корреляционных пиках. Проанализировано как ведут себя параметры пиков в широком диапазоне расстояний: нелинейное возрастание СКО, наличие минимума и точки перегиба у коэффициента негауссовости и асимметрии корреляционных пиков соответственно.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ 20-12-00356 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им.Н.Э. Баумана.

#### Литература

1. J.-P. Hansen, I. R. MacDonald. Theory of simple liquids. London: Academic, **2006**
2. J. S. McCarley, N. W. Ashcroft Physical Review E, 55(5):4990–5003, **1997**
3. M. Tessarotto, C. Cremaschini The European Physical Journal Plus, 129(11), **2014**
4. S.O. Yurchenko et.al. Journal of Physics: Condensed Matter, 28(23):235401, **2016**
5. E.V. Yakovlev et.al. The Journal of Chemical Physics, 151(11):114502, **2019**
6. L.A. Mistryukova et.al. Physical Review B, 104(5), **2021**

## **О НОВОМ КЛАССЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА**

Норман Г. Э., Сайтов И. М.

*НИУ ВШЭ*

*gnorman@hse.ru*

**1. Химическая модель.** Плазменный фазовый переход (ПФП) [1] предсказан в рамках трёхкомпонентной модели. В уравнениях состояния и ионизационного равновесия учитывались кулоновское

взаимодействие между электронами и ионами и их короткодействующее эффективное квантовое отталкивание, атомы считались идеальным газом. При высоких неидеальностях система теряла устойчивость и расслаивалась на две фазы. Ван-дер-Ваальсов вид имела зависимость концентрации атомов от концентрации зарядов. Фазовое равновесие свелось к равенству концентраций атомов двух фаз.

Биберман и Норман [2] рассмотрели метастабильные состояния, порождаемые ПФП, и обнаружили их аномальный характер. Имеют место сильные перекрытия по объёму стабильной ветви одной фазы и метастабильной ветви другой на изотерме зависимости давления от объёма. В области перекрытия изотерма, в силу своего наклона, оказывается трехзначной функцией (три значения давления соответствуют одному значению объёма), в отличие от однозначной изотермы Ван-дер-Ваальса (рис. 1). В работе [3] аналогичная особенность обнаружена при исследовании фазового перехода, обусловленного диссоциацией молекул. Это позволило авторам [3] в 2022 году предложить объединить плазменный и диссоциационный фазовые переходы в новый класс фазовых переходов первого рода.

Другой особенностью, заслуживающей выделения ПФП в новый класс фазовых переходов, является то, что давление уменьшается по мере приближения к критической точке на рис. 1. Такое поведение также отличается от уравнения Ван-дер-Ваальса. На рис. 1 схематично изображены изотермы и бинадаль для газа Ван-дер-Ваальса (а) и флюида водорода (б). Линия сосуществования фаз выглядит как длинный, изогнутый и узкий язык, который довольно сложно ограничить и определить положение критической точки. Эта картина имеет место как в химической модели, так и при расчётах ТФП для флюида водорода [4].

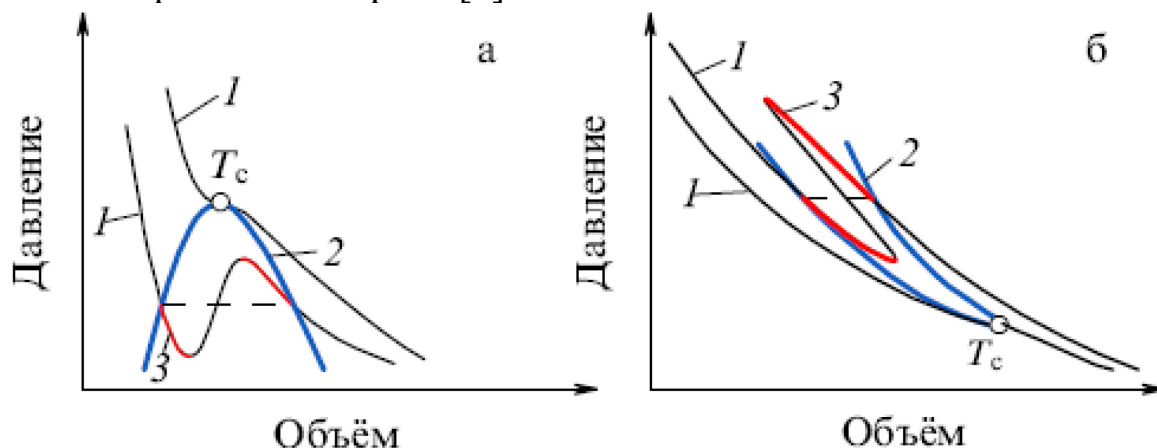


Рис. 1. Изотермы и критическая точка Ван-дер-Ваальса (а) и ПФП (б).

**2. ТФП.** К этой же задаче был применён метод теории функционала плотности (ТФП) [4]. Этот современный подход часто называют *ab initio* несмотря на содержащиеся в нём приближения. ТФП – это огромный шаг по сравнению с химической моделью. Однако между этими двумя подходами при описании фазового перехода флюид-флюид в разогретом плотном водороде с помощью ТФП и при описании ПФП в рамках химической модели есть важная принципиальная общность.

В обоих случаях имеет место скачок плотности, и он сопровождается скачком ионизации. Последнее в ТФП проявляется как скачок электропроводности, в химической модели – как увеличение скачком концентрации зарядов и степени ионизации. Эта внутренняя общность между результатами описания фазового перехода в рамках двух подходов привела и к качественной общности принципиальных результатов (рис. 1б). В рамках ТФП подтверждены особенности, предсказанные химической моделью, которые мы обсуждали выше.

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

#### Литература

1. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, ТВТ, **6**, 410, **1968**
2. Л. М. Биберман, Г. Э. Норман, ТВТ, **7**, 822, **1969**
3. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, ЖЭТФ, **161**, 238, **2022**
4. Г. Э. Норман, И. М. Сайтов, УФН, **191**, 1153, **2021**

### ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ В РЯДЕ Со СОДЕРЖАЩИХ ИЗОСТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ ЖЕЛЕЗНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

Павлов Н. С.<sup>1,2</sup>, Шейн И. Р.<sup>3</sup>, Перваков К. С.<sup>2</sup>, Некрасов И. А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

<sup>3</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*pavlovns@gmail.com*

Открытие высокотемпературных сверхпроводников на основе пниктидов и халькогенидов железа [1,2,3] породило поиск новых



химических или структурных аналогов и совершенно новых соединений данного класса, например [4,5]. Среди аналогов железных сверхпроводников есть сверхпроводящие системы, но с малой критической температурой сверхпроводящего перехода  $T_C$ , однако многие из вновь полученных систем не являются сверхпроводниками. Актуальным является теоретическое изучение таких систем (известных и потенциально возможных), в которых может реализоваться сверхпроводимость. Для теоретического изучения сверхпроводящего состояния необходимо знать электронную структуру нормальной фазы. Электронную структуру можно рассчитать, используя первопринципные зонные расчёты, которые основаны на теории функционала электронной плотности (DFT). Для изучения реальных соединений с электрон-электронными корреляциями используются расчётные схемы, объединяющие в себе первопринципные методы (DFT) и такие подходы как теория динамического среднего поля (DMFT) — DFT+DMFT [6].

В данной работе исследована электронная структура ряда изоструктурных аналогов железных сверхпроводников  $\text{BaCo}_2\text{P}_2$ ,  $\text{InCo}_2\text{As}_2$ ,  $\text{InKCo}_4\text{As}_4$  в рамках DFT+DMFT подхода. Установлено, что несмотря на достаточно большую величину электрон-электронных корреляций (локальное кулоновское взаимодействие на  $\text{Co-3d}$  оболочке  $U=4.0$  эВ, хундовское обменное взаимодействие  $J=0.85$  эВ) в рассмотренных системах наблюдается относительно небольшая величина перенормировки массы 1-2 на уровне Ферми. При этом корреляционные эффекты приводят к заметному смещению и сжатию спектра вдалеке от уровня Ферми и небольшому – вблизи.

Соединения  $\text{InCo}_2\text{As}_2$  и  $\text{InKCo}_4\text{As}_4$  экспериментально не синтезированы. DFT расчёты показали, что основным магнитным состоянием является парамагнитное. При этом вблизи уровня Ферми наблюдаются плоские или почти плоские зоны в направлении диагонали зоны Бриллюэна, что может привести к возникновению сверхпроводимости [7]. В результате учёта электрон-электронных корреляций в  $\text{InCo}_2\text{As}_2$  плоский участок зоны в  $\Gamma$ -X направлении смещается с 0.45 эВ в DFT до 0.35 эВ в DFT+DMFT, в P-N направлении с 0.2 эВ до 0.15 эВ. А плоский участок в  $\Gamma$ -Z направлении уходит с уровня Ферми на -0.15 эВ.

В системе  $\text{InKCo}_4\text{As}_4$  в DFT+DMFT зонной структуре на уровень Ферми попадают состояния в области точки M и в направлении  $\Gamma$ -Z, которые в DFT лежали выше (на 0.04 эВ). Тем самым при совершенно небольшой величине электронного или дырочного допирования в

InKCo<sub>4</sub>As<sub>4</sub> будут происходить переходы Лифшица. Плоские участки зон в DFT в направлении  $\Gamma$ -M и Z-A находятся в области 0.22 эВ, а в DFT+DMFT около 0.13 эВ. Поэтому в InKCo<sub>4</sub>As<sub>4</sub> потенциально при небольшом электронном допировании на уровень Ферми будут попадать плоские участки зон, что возможно приведёт к реализации сверхпроводимости. Аналогичные плоские участки в направлении диагонали зоны Бриллюэна наблюдаются в системе BaCo<sub>2</sub>P<sub>2</sub>. В DFT+DMFT они находятся примерно при 0.03 эВ.

Работа выполнена, при частичной поддержке РФФ (грант №21-12-00394).

### Литература

1. M.V. Sadovskii, Phys. Usp., **51**, 1201, **2008**
2. G.R. Stewart, Rev. Mod. Phys., **83**, 1589, **2011**
3. M.V. Sadovskii, Phys. Usp., **59**, 947, **2016**
4. M. Neupane, et al., Phys. Rev. B, **85**, 094510, **2012**
5. I.A. Nekrasov, M.V. Sadovskii, JETP Lett., **99**, 598, **2014**
6. G. Kotliar et al., Rev. Mod. Phys., **78**, 865, **2006**
7. T.T. Heikkilä, N.B. Kopnin, G.E. Volovik, JETP Lett., **94**, 233, **2011**

## ЛОКАЛИЗОВАННАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И ДИОДНЫЙ ЭФФЕКТ В СИСТЕМАХ СВЕРХПРОВОДНИК / ФЕРРОМАГНЕТИК СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Путилов А. В.<sup>1</sup>, Миронов С. В.<sup>1</sup>, Буздин А. И.<sup>2</sup>

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

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

В работе изучены транспортные свойства одномерных сверхпроводящих каналов, локализованных вблизи края полубесконечного слоя сверхпроводника (S), расположенного на подложке из ферромагнитного изолятора (F) (рис. 1a). Такие каналы могут формироваться за счет локального усиления сверхпроводящих свойств, обусловленного неоднородностью толщины S слоя или электронной прозрачности между S и F слоями. Показано, что при наличии спин-орбитального взаимодействия на S/F границе

критическая температура, при которой возникают локализованные сверхпроводящие состояния, зависит от угла между направлением обменного поля и краем S слоя. Также для таких локализованных состояний предсказан диодный эффект - различие в величине критического тока, текущего в двух противоположных направлениях вдоль канала.

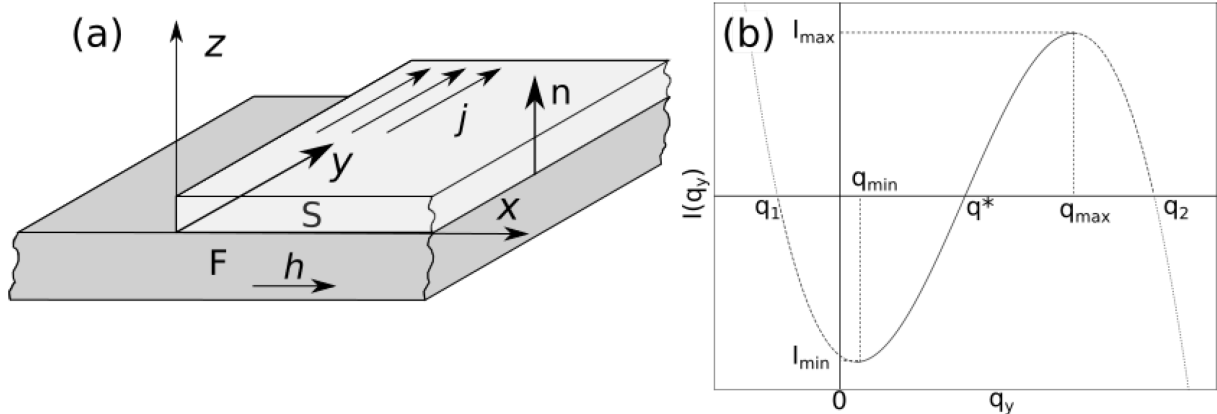


Рис. 1. (а) Схематичное изображение полубесконечной пленки сверхпроводника на поверхности ферромагнитного изолятора. (б) Типичная зависимость сверхпроводящего тока от волнового вектора модуляции волновой функции вдоль края S слоя (вдоль оси  $y$ ).

Расчет критической температуры и критического тока проводился в рамках модели Гинзбурга-Ландау, модифицированной с учетом наличия спин-орбитального взаимодействия. В данной модели свободная энергия сверхпроводящей пленки имеет вид:

$$F = -[\alpha(T) + \gamma_0 \delta(x)] |\psi|^2 + \beta |\psi|^4 + \alpha_0 \xi_0^2 |\nabla \psi|^2 - i[\boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \delta(x)] (\psi^* \mathbf{n} \times \nabla \psi - \text{c.c.}), \quad (1)$$

где  $\alpha(T)$  и  $\beta$  – стандартные параметры теории Гинзбурга-Ландау,  $\alpha_0 = \alpha(T=0)$ ,  $\xi_0$  – интерполированная к нулевой температуре длина когерентности,  $\nabla$  – оператор градиента в плоскости S пленки,  $\boldsymbol{\varepsilon}$  – вектор, пропорциональный константе спин-орбитального взаимодействия и обменному полю ферромагнетика. Наличие спин-орбитального взаимодействия на S/F границе учитывается в (1) путем добавления членов, содержащих  $\psi^* \mathbf{n} \times \nabla \psi$ , локальное усиление сверхпроводимости вблизи края S пленки описывается  $\delta$ -функциональной поправкой  $\gamma_0 \delta(x)$ , а возникающая при этом поправка к величине спин-орбитального взаимодействия описывается слагаемым  $\boldsymbol{\varepsilon}_1 \delta(x)$ . Локализованная волновая функция, минимизирующая функционал при температуре, близкой к критической, имеет вид  $\psi = \exp(iq_y y - px)$ .

Показано, что при ориентации обменного поля перпендикулярно краю сверхпроводника (но лежит в плоскости пленки) критическая температура возникновения локализованного сверхпроводящего состояния оказывается выше на величину  $\Delta T = 4\varepsilon_1^2 \gamma_0^2 \alpha_0^{-3} \xi_0^{-6}$  по сравнению со случаем, когда обменное поле параллельно краю.

Известно, что диодный эффект может обеспечиваться при учете высших градиентов в функционале свободной энергии [1], а также при учете экранировки транспортного тока в сверхпроводящем слое [2]. В данной работе показано, что в случае, когда обменное поле перпендикулярно краю сверхпроводника, может наблюдаться диодный эффект в локализованном сверхпроводящем состоянии: на зависимости сверхпроводящего тока от волнового вектора  $q_y$  значения тока распаривания для двух возможных направлений его протекания (вдоль и против оси  $y$ ), оказываются различными (рис. 1b). При этом разность значений критического тока составляет

$$(I_{\max} - |I_{\min}|) / (I_{\max} + |I_{\min}|) = 2 / \sqrt{6} \cdot \varepsilon_1 (T_c^* - T)^{1/2} T_c^{-1/2} \gamma_0^{-1} \xi_0^{-1},$$

где  $T_c^*$  - температура зарождения сверхпроводящего состояния для данной ориентации обменного поля.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 20-12-00053.

Литература:

1. A. Daido, Y. Ikeda, Y. Yanase, Phys. Rev. Lett. **128**, 037001, (2022)
2. Zh. Devizorova, A. V. Putilov, I. Chaykin, S. Mironov, A. I. Buzdin, Phys. Rev. B **103**, 064504 (2021)

## **ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ПАРАМЕТРЫ БЕСФОНОННОЙ ЛИНИИ GeV ЦЕНТРОВ В АЛМАЗЕ В ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР 20-180К**

А.А. Разгулов, С.Г. Ляпин, А.П. Новиков, Е.А Екимов  
*Институт физики высоких давлений им. Вережагина РАН*  
*aleksandr.razgulov@phystech.edu*

В последнее время центры окраски в алмазе привлекают к себе всё больше внимания со стороны исследовательских групп по всему миру. Во многом этот повышенный интерес связан с набором уникальных характеристик (таких как яркость и узость бесфоновой

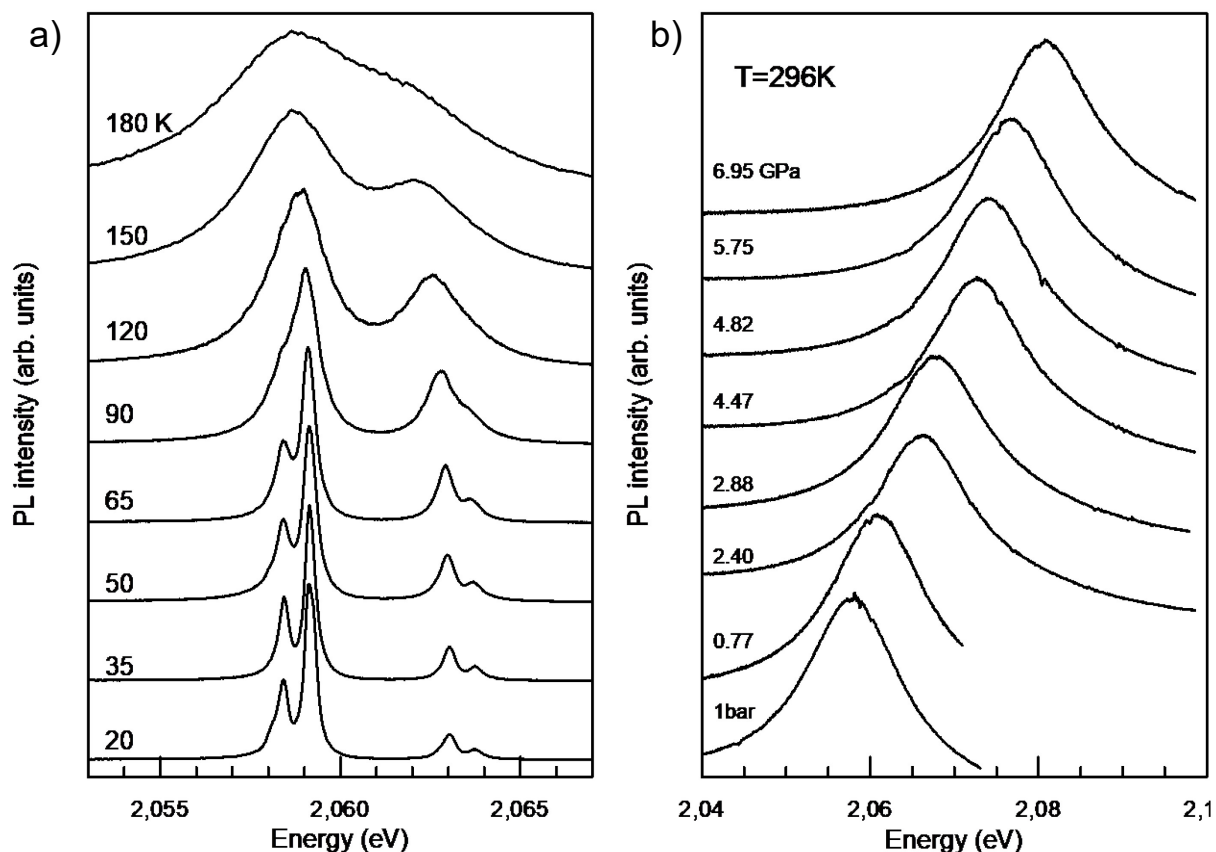


Рисунок 1.(а) Эволюция бесфононной линии GeV центра с увеличением температуры; (б) эволюция бесфононной линии GeV центра с ростом давления

линии в спектрах фотолюминесценции, спиновые свойства центров и т.д.), чрезвычайно востребованных в новейших технологических отраслях (биомедицинские исследования, квантовые технологии обработки и передачи информации и т.д.)[1]. Однако большинство уникальных спектроскопических характеристик центров окраски в алмазе демонстрирует сильную зависимость от температуры, что существенно осложняет массовую реализацию перспективных технологий на базе этих центров (в частности, при повышении температуры от 10К до комнатной наблюдаются сильное уширение и сдвиг бесфононной линии). Вместе с тем до настоящего времени вопрос о природе наблюдаемых температурных эффектов всё еще остается дискуссионным. В представленной работе нами была предпринята попытка приблизиться к его окончательному решению.

Для выяснения природы вышеупомянутых температурных эффектов нами была проведена серия работ по исследованию влияния как давления (рис 1(б)), так и температуры (рис. 1(а)) на фотолюминесценцию GeV центров в алмазе. Совместное использование полученных данных позволило учесть комплексный

характер температурных эффектов, выделить и рассмотреть вклады и электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ), и температурного расширения алмазной решётки (ТРР) [2]. Был произведен анализ полученных температурных зависимостей выделенного вклада ЭФВ в уширение и сдвиг бесфононной линии и сравнение этих зависимостей с существующими теоретическими моделями [3-5]. В результате было установлено, что доминирующим механизмом ЭФВ является квадратичное электрон-фононное взаимодействие в случае сильного смягчения упругих постоянных на оптическом переходе.

Полученные результаты приводят к пересмотру широко распространённых представлений о фононно-индуцированных переходах между подуровнями расщепленных основного и возбужденного состояний, как о доминирующем механизме ЭФВ, ответственном за наблюдаемые температурные эффекты в центрах окраски. Кроме того, выяснение природы доминирующего механизма ЭФВ в центрах окраски в алмазе открывает новые возможности для дальнейших исследований по контролю их спектроскопических характеристик.

#### Литература

1. I. Aharonovich et al., Rep. Prog. Phys., 2011. V. 74, P. 076501.
2. G. Davies, Rep. Prog. Phys., 1981. V. 44, P. 787-830.
3. K.D Jahnke et al., New J. Phys., 2015. V. 17, 043011.
4. V. Hizhnyakov et al., Phys. Status Solidi B, 2002. V. 234, P. 644-653.
5. K.-M.C Fu et al., Phys. Rev. Lett., 2009. V. 103, 256404

### **СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СПЛАВА АЛТЭК ПОСЛЕ РАДИАЛЬНО-СДВИГОВОЙ ПРОКАТКИ**

Распосиенко Д. Ю.<sup>1</sup>, Петрова А. Н.<sup>1</sup>, Астафьев В. В.<sup>1</sup>, Яковлева А. О.<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>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», [annet881@list.ru](mailto:annet881@list.ru)

Одним из главных недостатков алюминиевых сплавов, ограничивающих их широкое применение, является их низкая жаропрочность. Среди промышленных деформируемых сплавов

наиболее высокой термостойкостью обладают сплавы на базе системы Al–Mn–Cu. Исследуемый сплав (Al-основа; 1.6 Cu; 1.8 Mn; 0.4 Zr; 0.15 Cr) обладает значительным преимуществом деформационной обработки литых слитков без использования предварительных дорогостоящих операций гомогенизации, которые обязательны для всех промышленных жаропрочных алюминиевых сплавов. Данный эффект достигается за счет понижения содержания меди в сплаве менее чем до 2 %, при котором основная ее часть (1,5 %) находится в алюминиевом твердом растворе. При этом формирующаяся литая структура обладает значительным потенциалом для улучшения механических характеристик при последующей термомеханической обработке, в результате которой образуются наноразмерные частицы вторых фаз, обеспечивающих повышение механических свойств и термическую стабильность сплава. Таким образом, актуальной задачей стало исследование возможности использования эффективных способов деформационно-термической обработки для совершенствования структуры перспективного модельного Al-Cu-Mn-Zr сплава и улучшения его механических свойств.

Экспериментальный сплав был приготовлен в электропечи сопротивления в графитошамотном тигле. Заливка расплава производилась при 900 °С в графитовую изложницу с внутренней полостью диаметром 40 мм и высотой 200 мм. Результаты проведенного структурного анализа показали, что микроструктура исследуемого сплава представлена алюминиевым твердым раствором и небольшим количеством дисперсных эвтектических прожилок фазы  $Al_2Cu$  и частицами фазы  $Al_6(Fe, Mn)$ .

В качестве основного метода деформации в работе была выбрана радиально-сдвиговая прокатка (РСП), являющаяся одним из методов интенсивной пластической деформации (ИПД). При этом в отличие от многих лабораторных способов ИПД РСП относится к промышленным методам, позволяющим получить большемасштабные изделия. Благодаря достижению очень высоких степеней деформации до  $\epsilon=4$  в обрабатываемой металлической заготовке происходит растворение вторых фаз, формируется пересыщенный твердый раствор и ультрамелкозернистая структура вплоть до нанометрического масштаба, оказывающие значительное влияние на кинетику и механизмы фазовых превращений. Создание подобной микроструктуры обеспечивает потенциал для дальнейшего дополнительного повышения механических свойств и термостойкости сплава при последующей термообработке за счет выделения

высокодисперсных вторичных фаз  $Al_{20}Mn_3Cu_2$  и  $Al_3Zr$ . РСП проводилась при температуре 280 °С, в два прохода по схеме  $\varnothing 40 \rightarrow \varnothing 31 \rightarrow \varnothing 24$  мм без промежуточных отжигов на опытно-промышленном стане РСП 14-40. Суммарный коэффициент вытяжки составил  $\mu=3$ .

В результате исследований были получены новые сведения об изменении фазового состава модельного Al-Cu-Mn-Zr-Cr после РСП: количественные и качественные характеристики вторых фаз, данные о кинетике их выделения и растворения, количественные и качественные данные о зеренно-субзеренной структуре алюминиевой матрицы. Изучение тонкой структуры деформированного сплава выявило, что в процессе деформации происходило формирование преимущественно полосовой структуры, состоящей из субзерен длиной до 200 нм, и наличие дисперсоидов двух типов  $Al_{20}Mn_3Cu_2$  и  $Al_3Zr$ . Также была определена взаимосвязь структурных характеристик и статических механических свойств деформированного сплава. Поскольку слиток перед деформацией не подвергался термической обработке, то отжиг деформированного материала должен приводить к распаду пересыщенного твердого раствора. На деформационное упрочнение должно накладываться дисперсионное твердение. Однако эффекта от дисперсионного твердения можно ожидать в большей степени за счет выделения дисперсоидов  $Al_3Zr$ , т.к. выделение частиц фазы  $Al_{20}Cu_3Mn_2$  будет сопровождаться уменьшением вклада от Cu и Mn в твердорастворное упрочнение.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-23-00904).

## **ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ УСИЛЕНИЕ: ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЕ ОПИСАНИЕ НА ОСНОВЕ ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКИ ШВИНГЕРА-КЕЛДЫША**

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*

Изучение динамики открытых квантовых систем является сложной задачей, для решения которой разработан целый ряд



подходов, например, можно использовать управляющее уравнение или решать уравнения движения для операторов. В случае периодического воздействия на систему возможно применение представления Флоке для получения эффективного стационарного гамильтониана. С практической точки зрения интересна ситуация когда гамильтониан системы содержит слагаемые с тремя операторами и более. Наличие таких слагаемых представляет особую сложность при построении теории.

В настоящей работе рассмотрена именно такая ситуация. Мы исследуем модель, описываемую эффективным одномерным бозонным гамильтонианом, состоящим из квадратичной части, описывающей невзаимодействующие моды, и части, образованной либо тройками, либо четверками операторов, соответствующей взаимодействию между модами. При этом предполагается, что к системе приложена сильная когерентная накачка и можно считать, что в начальном состоянии сильно заселена только одна мода, а заселенность остальных мод пренебрежимо мала. Нас будет интересовать медленная динамика этой системы, вызванная передачей энергии между модами благодаря неквадратичному характеру взаимодействующей части гамильтониана.

Вдохновленные работой [1], в которой, однако, изучалась кинетика жидкости Латтинджера, мы также применили методы теории поля в рамках теории Келдыша для изучения медленной неравновесной динамики описанной выше системы. Используя кинетические уравнения и уравнения Дайсона-Швингера в формализме Намбу, мы получили замкнутую систему динамических уравнений, описывающих кинетику нормальной и аномальной плотностей бозонных возбуждений. Мы отдельно рассмотрели два случая, когда часть гамильтониана, соответствующая взаимодействию между модами, образована либо тройками, либо четверками операторов. В первом случае для описания медленной динамики необходимо рассмотреть второй порядок по взаимодействию между модами, в то время как во втором случае не исчезающий эффект есть уже в первом порядке. При этом между этими случаями есть связь и при определенных условиях результаты в обоих случаях сводятся друг к другу.

В соответствии с результатами, полученными при анализе уравнений движения для операторов в аналогичной системе [2], мы также показали, что в рамках рассмотренной модели амплитуда нерезонансных мод может либо осциллировать во времени, либо

экспоненциально возрастать в зависимости от конкретных параметров.

### Литература

1. M. Buchhold and S. Diehl, Eur. Phys. J. D **69** 224 **2015**
2. O. Yaakobi, et. al., Phys. Rev B **87**, 144301 **2013**

## САМООРГАНИЗАЦИЯ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ – РОЛЬ ТРАНСЛЯЦИОННОГО И ОРИЕНТАЦИОННОГО ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА

Рыжов В. Н., Гайдук Е. А., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.  
*Институт физики высоких давлений РАН*  
*ryzhov@hppi.troitsk.ru*

В докладе обсуждаются основные современные сценарии самоорганизации – плавления, кристаллизации, перехода в стекло - двумерных систем, с учетом влияния вида потенциала на фазовые переходы. После появления теории фазовых переходов в двумерных вырожденных системах – теории Березинского-Костерлица-Таулеса (БКТ) [1-3] – стали активно развиваться теории двумерного плавления. Как известно, в случае трех измерений плавление всегда происходит посредством перехода первого рода. В то же время в случае двух измерений ситуация гораздо более сложная. В настоящее время можно говорить, по крайней мере, о трех возможных сценариях плавления. Прежде всего, это теория Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (BKTHNY) [3-5], в которой был предложен нестандартный сценарий плавления двумерных кристаллов посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой. При этом фазовый переход первого рода также может реализоваться [6]. Кроме того, сравнительно недавно был предложен еще один сценарий плавления, в рамках которого плавление также может происходить посредством двух переходов, однако при этом переход твердое тело - гексатическая фаза происходит посредством непрерывного перехода типа БКТ, а переход гексатическая фаза - изотропная жидкость - посредством перехода первого рода [7-19]. Физический механизм рассматриваемых переходов определяется поведением

топологических дефектов – дислокаций и дисклинаций – связанных с трансляционным и ориентационным параметрами порядка.

В то же время переход в стекло в двух измерениях, в отличие от трех измерений, также определяется взаимодействием этих двух этих параметров [20].

Подробно обсуждаются методы компьютерного моделирования, применяемые для анализа возможных сценариев плавления в зависимости от вида потенциала.

Работа поддержана грантом РФФИ 19-12-00092.

### Литература

1. В. Л. Березинский, ЖЭТФ, **59**, 907, **1970**
2. J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, J. Phys. C, **6**, 1181, **1973**
3. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН, **187**, 921, **2017**
4. D. R. Nelson, V. I. Halperin, Phys. Rev. B, **19**, 2457, **1979**
5. A. P. Young, Phys. Rev. B, **19**, 1855, **1979**
6. В. Н. Рыжов, ЖЭТФ, **100**, 1627, **1991**
7. E. P. Bernard, W. Krauth, Phys. Rev. Lett., **107**, 155704, **2011**
8. S. C. Kapfer, W. Krauth, Phys. Rev. Lett., **114**, 035702, **2015**
9. E. N. Tsiok, D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, Phys. Rev. E, **92**, 032110, **2015**
10. E. N. Tsiok, Y. D. Fomin Y.D., Ryzhov V.N., Physica A, **490**, 819 **2018**
11. D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Soft Matter, **10**, 4966, **2014**
12. D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, J. Chem. Phys., **141**, 18C522, **2014**
13. N. P. Kryuchkov, S. O. Yurchenko, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Soft Matter, **14**, 2152, **2018**
14. E. A. Gaiduk, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Molecular Physics, **117**, 29109, **2019**
15. Y. D. Fomin, E. A. Gaiduk E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Molecular Physics, **116**, 3258, **2018**
16. E. N. Tsiok, E. A. Gaiduk, Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, Soft Matter, **16**, 3962, **2020**
17. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН, **190**, 449, **2020**

18. E. N. Tsiok, Yu. D. Fomin, E. A. Gaiduk, and V. N. Ryzhov, Phys. Rev. E, **103**, 062612, 2021
19. E. N. Tsiok, Yu. D. Fomin, E. A. Gaiduk, E. E. Tareyeva, V. N. Ryzhov, P. A. Libet, N. A. Dmitryuk, N. P. Kryuchkov, S. O. Yurchenko, J. Chem. Phys., **156**, 114703, 2022
20. S. Vivek, C. P. Kelleher, P. M. Chaikin, E. R. Weeks, PNAS, **114**, 1850, 2017

## АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ ЖИДКОСТЕЙ 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*

Расчет количественных характеристик атомного транспорта в жидкостях, таких как вязкость и коэффициенты диффузии, является одной из важнейших задач теории конденсированного состояния. Зависимости значений транспортных свойств от температуры, давления, концентрации и других термодинамических параметров позволяют извлечь важнейшую информацию об эволюции структуры и атомарной динамики расплавов. С практической точки зрения, значения транспортных коэффициентов расплавов необходимы для технологии металлургической разливки, создания жидких теплоносителей, совершенствования ионных батарей, разработки новых смазочных материалов и т.п.

Надежное экспериментальное определение таких характеристик как вязкость и коэффициенты диффузии является сложной, а иногда и практически невыполнимой задачей. 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 многих практически важных задач, в частности 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 реальных системах (особенно многокомпонентных). 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 [1-3]. 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. Использование MLIP представляет собой золотую середину в вопросе выбора между точностью и вычислительной эффективностью.

Расчет транспортных свойств жидкостей является одним из перспективных приложений моделирования на основе MLIP. Однако, в силу новизны подхода, данное приложение MLIP еще не было достаточной мере протестировано и изучено. Отсутствуют рекомендации по выбору оптимальных моделей машинного обучения и их параметров, стратегий формирования адекватных тренировочных датасетов и выбора оптимальных методов вычисления транспортных свойств (особенно вязкости).

В данной работе перечисленные выше вопросы 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>.

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

## Литература

1. A. Singraber, J. Behler, C. Dellago, J. Chem. Theory Comput., **15**, 1827, **2019**.
2. F. Karsai, G. Kresse, M. Bokdam, Phys. Rev. Lett. 122, 225701, (2019)
3. T. Wen, L. Zhang, H. Wang, E. Weinan, D. J. Srolovitz, Materials Futures, **1**, 022601, **2022**.

### **ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИСТЕМЫ НА КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ**

Савилов Т. М.<sup>1,2</sup>, Ланкин А. В.<sup>1,2</sup>, Смирнов Г. С.<sup>1,2,3</sup>, Норман Г. Э.<sup>1,2,3</sup>  
<sup>1</sup>ОИВТ РАН <sup>2</sup>МФТИ (НИУ) <sup>3</sup>НИУ ВШЭ  
*savilov.tm@gmail.com*

Диоксид циркония используется в водородной энергетике для электролиза из-за высокой проводимости и тугоплавкости [1]. В связи с этим представляет интерес его компьютерное моделирование и дальнейшее предсказание свойств новых материалов.

Для базовой системы использовался потенциал Борна-Кулона, моделирование происходило в программном пакете LAMMPS.

Было обнаружено [2], что использование модели с наличием эффекта поляризации ионов изменяет получаемые результаты. Суть модели заключается в разделении ионов на тяжёлое ядро и лёгкую оболочку. Их заряды имеют разные знаки, взаимодействие в пределах одной пары происходит согласно уравнению гармонического осциллятора. Все измерения проводились как с учётом поляризации, так и без учёта.

Также при выводе на равновесии системы с учётом эффекта поляризации можно настроить термостат таким образом [3], чтобы относительная скорость ядер и оболочек не изменялась под его действием. Оба варианта термостата использовались и сравнивались. Получено, что в системе, где термостат не меняет относительную скорость, скорости оболочек циркония значительно ниже.

Исследован размерный эффект для монокристаллического диоксида циркония. Для системы более чем с 10 тысячами атомов

изменения коэффициента диффузии достигают минимальных значений.

Использована система бикристалла [4] для исследования влияния границы на коэффициент диффузии. Получено, что наличие границы увеличивает коэффициент диффузии системы. Также исследована зависимость от размеров монокристаллических зёрен.

Проведено моделирование для различных температур, проведено сравнение с экспериментальными данными. Получено, что учёт поляризации в целом улучшает предсказательные способности системы.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№18-19-00734).

### Литература

1. Радченко Р.В., Мокрушин А.С., Тюльпа В.В., Водород в энергетике. Уч. пос. - Екатеринбург: Изд. Уральск. универ., **2014**
2. Savilov T. M., Lankin A. V. and Norman G. E. J. Phys.: Conf. Ser. **1787** 012011 **2021**
3. P J Mitchell and D Fincham **1993** J. Phys.: Condens. Matter **5** 1031
4. Савилов Т.М. **2021** Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ, с. 513-514

## **ВЛИЯНИЕ УЧЕТА НУЛЕВЫХ КОЛЕБАНИЙ НА ПАРАМЕТРЫ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОВОДЯЩЕГО СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ**

Сайтов И. М.<sup>1,2,3</sup>  
<sup>1</sup>НИУ ВШЭ, <sup>2</sup>ОИВТ РАН, <sup>3</sup>МФТИ (НИУ)  
*isaitov@hse.ru*

Металлизация кристаллического водорода при высоких давлениях теоретически исследуется с 1935 г. В оригинальной работе [1] предполагается, что молекулы водорода диссоциируют, образуя объемно-центрированную кубическую решетку с одним протоном в элементарной ячейке. Есть два предполагаемых механизма образования металлического твердого водорода. Первый механизм основан на предсказании [1] и связан с диссоциацией молекул

водорода с образованием атомной решетки. Второй механизм предполагает, что металлизация кристаллического водорода связана с перекрыванием зон проводимости и валентной зоны и структурными превращениями, но кристалл водорода остается молекулярным.

В данной работе метод молекулярной динамики на интегралах по траекториям в рамках теории функционала плотности применяется для изучения влияния квантовых эффектов ядер и нелокальных обменно-корреляционных функционалов плотности применяются для расчета уравнения состояния вблизи металлизации кристаллического молекулярного водорода. Используемый метод позволяет учесть влияние нулевых колебаний на устойчивость связи в молекуле водорода и, следовательно, на давление металлизации, как это было в [2] для аналогичного фазового перехода в жидком водороде. Проводится расчет парной корреляционной функции, плотности электронных состояний и электропроводности кристаллического водорода.

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

#### Литература

1. E. Wigner, H. V. Huntington, *J. Chem. Phys.* **3**, 764–770, 1935
2. M. A. Morales, J. M. McMahon, C. Pierleoni, D. M. Ceperley *Phys. Rev. Lett.* **110**, 065702, 2013

### **НОВОЕ ПРОМЕЖУТОЧНО-ВАЛЕНТНОЕ СОЕДИНЕНИЕ $\text{YbZn}_2$**

Д.А. Саламатин<sup>1,2</sup>, К.Е. Клементьев<sup>3</sup>, М.В. Магницкая<sup>1</sup>,  
Н.М. Щелкачев<sup>1</sup>, В.А. Сидоров<sup>1</sup>, М.Г. Козин<sup>4</sup>, И.Л. Ромашкина<sup>4</sup>,  
А.В. Николаев<sup>4</sup>, М. Будзинский<sup>5</sup>, А.В. Цвященко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений РАН, Россия, г. Троицк*

<sup>2</sup>*Объединенный институт ядерных исследований, Россия, г. Дубна*

<sup>3</sup>*Lund University, MAX IV Laboratory, Lund, Sweden*

<sup>4</sup>*НИИЯФ МГУ, Россия, г. Москва*

<sup>5</sup>*Institute of Physics, M. Curie-Skłodowska University, Lublin, Poland*  
*dasalam@gmail.com*

Соединения  $R\text{Zn}_2$  с редкоземельными ионами  $R = \text{Y}, \text{La-Lu}$  (за исключением  $\text{Pm}$ ) кристаллизуются в орторомбическую структура типа  $\text{CeCu}_2$  ( $\text{KHg}_2$ ) с пространственной группой  $Im\bar{m}$ . Большинство



из этих имеют температуры магнитного упорядочения в диапазоне 5-70 К. Соединения  $GdZn_2$  и  $ErZn_2$  имеют ферромагнитные структуры, в  $NdZn_2$  наблюдается сосуществование ферромагнитной и антиферромагнитных фаз, а в остальных соединениях ( $R = Ce, Eu, Tb, Dy, Ho, Tm$ ) структура антиферромагнитная.

С использованием техники синтеза при высоком давлении и высокой температуре нами была получена новая гексагональная фаза соединения  $YbZn_2$  со структурой типа  $MgZn_2$  (C14) с кристаллографическими параметрами приведенными в Табл. 1.

Табл. 1. Кристаллографические параметры гексагональной новой фазы высокого давления  $YbZn_2$

YbZn <sub>2</sub> (пр. гр. № 194, MgZn <sub>2</sub> -тип) V = 238.489 Å <sup>3</sup>			
a	5.5724(1) Å		
c	8.8683(1) Å		
атом	x	y	z
Yb (4f)	1/3	2/3	0.558(1)
Zn <sub>1</sub> (6h)	0.167(1)	0.334(1)	1/4
Zn <sub>2</sub> (2a)	0	0	0

Ранее соединение  $YbZn_2$  было известно только в орторомбической структуре типа  $CeCu_2$ . У данного соединения имеется полиморфная модификация неизвестного типа, переход в которую был обнаружен из эксперимента по высокотемпературной рентгеновской дифракции при 300° С и измерении электрического сопротивления в виде широкой аномалии при температуре 400 ± 50°С.

С помощью расчётов из первых принципов было показано, что соединение  $YZn_2$  имеет структурный фазовый переход в гексагональную фазу  $MgZn_2$  выше давления  $P_{tr} = 19.5$  GPa. Также данная фаза наблюдалась для соединений  $CaZn_2$  (Ca может рассматриваться как двухвалентный аналог Yb) и  $ScZn_2$ .

X-ray Absorption Spectroscopy (XAS) измерения проведенные на синхротроне MAX IV в г. Лунд (Швеция) при комнатной температуре и атмосферном давлении показали, что Yb в гексагональной фазе  $YbZn_2$  находится в промежуточно-валентном состоянии со средним значением валентности 2.55(5). Для сравнения, в изоструктурном промежуточно-валентном соединении  $YbAg_2$  средняя валентность Yb составляет 2.8 при нормальных условиях. При этом, с увеличением внешнего давления, Yb испытывает двухстадийный валентный

переход к трехвалентному состоянию с критическими давлениями 8 и 16 GPa.

Измеренные спектры возмущенных угловых гамма-гамма корреляций (ВУК) с использованием пробных ядер  $^{111}\text{Cd}$  были обработаны с использованием одной квадрупольной частоты с ненулевым параметром асимметрии:  $V_{zz} = 1.08(3) * 10^{17} \text{ V/cm}^2$ ,  $\eta = 0.38(5)$ . Это указывает на то, что пробные ядра локализовались в узлах Zn (*6h*). Такой вывод подтверждается проделанным расчётами градиента электрического поля с использованием DMFT. Проведенные ВУК измерения при давлении 1.5 GPa не обнаружили заметного изменения в спектрах. Известно, что градиент электрического поля, измеренный на редкоземельных узлах, линейно связан с валентностью Yb. Отсюда может быть сделан вывод, что валентность Yb в гексагональной фазе  $\text{YbZn}_2$  слабо зависит от внешнего давления на отрезке 0 – 1.5 GPa.

Данная работа была поддержана грантами РФФИ № 22-12-00008 и полномочного представителя республики Польша в Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна).

## СОСТОЯНИЕ “СВЯЗАННОЙ СВЕТИМОСТИ” В РАСШИРЕННОЙ МОДЕЛИ ДИКЕ

Сеидов С. С., Мухин С. И.

*НИТУ “МИСиС”, кафедра Теоретической Физики и Квантовых Технологий*  
*alikseidov@yandex.ru*

Расширенная модель Дике описывает взаимодействие электромагнитного поля в одномодовом резонаторе с ансамблем двухуровневых систем [1-2]. Электромагнитное поле представлено, как квантовый осциллятор с координатой  $q$  и импульсом  $p$ . Ансамбль двухуровневых систем описывается спиновыми операторами  $S_{x,y,z}$  с полным спином  $S = N/2$ , где  $N$  – число двухуровневых систем в ансамбле. Гамильтониан модели имеет вид

$$H = \frac{p^2 + \omega^2 q^2}{2} + gpS_y - \omega_0 S_z + (1 + \epsilon) \frac{g^2}{2} S_y^2, \quad (1)$$

где  $\omega$  – частота моды электромагнитного поля,  $g$  – константа связи

резонатора с ансамблем двухуровневых систем,  $\omega_0$  – расстояние между уровнями энергии двухуровневых систем,  $\epsilon$  – коэффициент, описывающий характер прямого взаимодействия между двухуровневыми системами в ансамбле. При  $\epsilon = -1$  прямое взаимодействие между двухуровневыми системами антиферромагнитное.

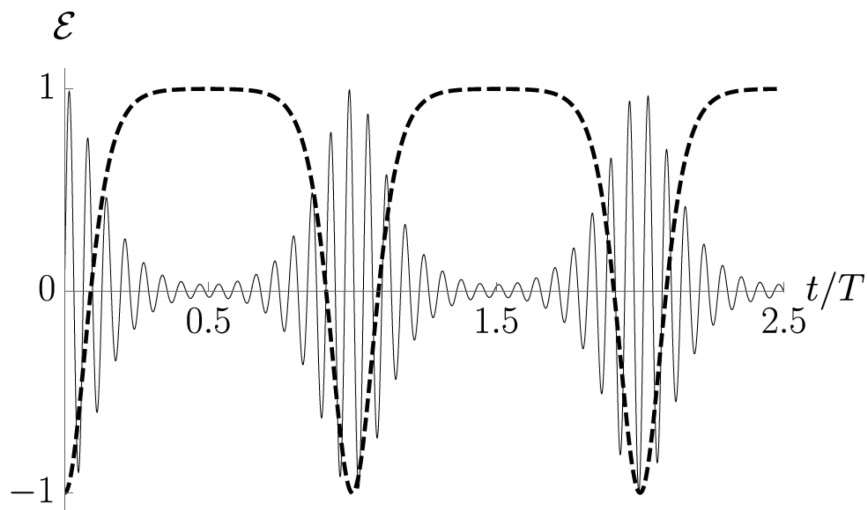


Рис. 1: График зависимости от времени энергии спиновой подсистемы  $-\omega_0 S_z(t)$  (пунктирная линия) и дипольной энергии в полости (сплошная линия) в состоянии “связанной светимости”. Обе кривые нормированы так, чтобы их амплитуды на графике совпадали.

Мы исследуем квазиклассическую динамику расширенной модели Дике, записывая классические гамильтоновы уравнения движения, следующие из гамильтониана (1). Для траекторий, таких что  $p \approx -gS_y$  и  $q \approx 0$ , уравнения движения для спиновой части возможно решить аналитически. Решения выражаются через функции Якоби, например, для проекции спина на ось z:

$$S_z(t) = S(1 - 2 \operatorname{cn}^2(\frac{g}{g_c \sqrt{k}} t, k)), k = \frac{2}{E + \omega_0/S}. \quad (2)$$

Здесь  $g_c$  – критическая константа связи, при которой в расширенной модели Дике возникает сверхизлучательный фазовый переход [2],  $E$  – полная энергия системы. Данное решение описывает периодические биения спина и, соответственно, электромагнитного поля в полости (импульс фотонного осциллятора пропорционален проекции спина на ось y). Во время биений происходит перекачка энергии от спиновой подсистемы к электромагнитному полю в полости и обратно, образуется состояние “связанной светимости”. На рис. 1 изображена

зависимость от времени энергий ансамбля двухуровневых систем и электромагнитного поля.

### Литература

1. R. H. Dicke, "Coherence in spontaneous radiation processes," Phys. Rev., vol. 93, pp. 99–110, **1954**.
2. D. De Bernardis, T. Jaako, and P. Rabl, "Cavity quantum electrodynamics in the nonperturbative regime," Phys. Rev. A, Vol. 97, p. 043820, **2018**.

## **ВЫЧИСЛЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ДЛИН В ДВУМЕРНЫХ ЖИДКОСТЯХ С ПОТЕНЦИАЛОМ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА**

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

Изучение критических явлений в двумерных системах играет важную роль в понимании фазовых переходов в ряде областей: от фотоники и электроники [1], до новых материалов [2] и биофизики [3]. В качестве модельной системы для изучения критических явлений может быть использована система коллоидных суспензий во внешнем вращающемся электрическом поле с управляемым межчастичным взаимодействием [4-6].

В данной работе анализируется подход к расчету корреляционной длины  $\xi$  и критического показателя  $\nu$  в двумерных системах с использованием корреляционной функции  $C(r)$  обратных площадей ячеек Вороного. Предложенный подход потенциально может быть применен для экспериментальных двумерных коллоидных систем.

Для изучения эффективности подхода проведено моделирование системы методом молекулярной динамики в области выше критической температуры. Потенциал взаимодействия частиц имеет следующий вид:

$$\phi_{12-6}(r) = 4 \epsilon \left[ \left( \frac{\lambda}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\lambda}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где  $\phi_{12-6}$  потенциал Леннарда-Джонса (LJ12-6),  $\epsilon$  и  $\lambda$  – сила и радиус взаимодействия соответственно.

В рассматриваемой системе был рассчитан коррелятор системы, как произведение обратных площадей ячеек Вороного частиц с радиус векторами  $r$  и  $r'$ , усредненное по каждой частице с радиус-вектором  $r'$ :

Коррелятор  $C(r)$  описывается функцией Макдональда [7]:

$$C(r) \sim r^{\frac{d}{2}-1} K_{d/2-1} \left( \frac{r}{\xi} \right), \quad (2)$$

где  $d$  – размерность системы,  $K_\nu$  – функция Макдональда  $\nu$ -го порядка.

Было проведено аппроксимирование коррелятора  $C(r)$ , вычисленного для системы LJ12-6 функцией Макдональда нулевого порядка (2). Из аппроксимации определены корреляционные длины в экспериментальной системе при различных эффективных температурах.

Поведение корреляционной длины в области критической температуры описывается степенным законом, показателем которого является критический индекс.

В рассматриваемой системе LJ12-6 был определен критический индекс  $\nu = 1.00 \pm 0.07$ , который с доверительным интервалом  $P = 0.95$  аппроксимирует зависимость корреляционных длин от эффективной температуры в исследуемой системе.

Таким образом, подход к расчету корреляционных длин с использованием корреляции обратных площадей ячеек Вороного был апробирован на двумерной системе LJ12-6. Оценены корреляционные длины в области выше критического перехода. Определен критический показатель, описывающий поведение корреляционных длин в флуктуационной области. Результаты работы согласуются с экспериментальными [8] и с теоретическими данными [9]. Описанный подход оценки критического индекса применим для двумерных систем и может быть использован для исследования критических явлений в экспериментальных системах коллоидных частиц во внешних электрических вращающихся полях.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 20-12-00356, РФФИ № 19-12-00092 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э. Баумана.

## Литература

1. Xi X. et al. Nature Physics, **12**, 1432016, **2016**
2. Yang H. et al. Nature Physics, **13**, 931–937, **2017**
3. Lenne P.F. et al. Nature Communications, **13**, 1–14, **2022**
4. Yakovlev E.V. et al. Sci. rep., **7**, 1–10, **2017**
5. Komarov K.A. et al. Soft Matter, **16**, 35, 8155-8168, **2020**
6. Yakovlev E.V. et al. Journal of Colloid and Interface Science, **608**, 564-574, **2022**
7. Landau L.D. et al., Elsevier, **6**, **2013**
8. Elmers H. et al. Phys. Rev. let., **73**, 898, **1994**
9. Kadanoff L. et al. Rep. Prog. Phys., **30**, 615, **1967**

## ПЕРЕХОДЫ МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР И ЗАРЯДОВЫЕ СТРАЙПЫ В КОНДО-ИЗОЛЯТОРЕ $\text{YbB}_{12}$ И ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ЕГО ОСНОВЕ

Случанко Н.Е., Азаревич А.Н.

*Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, Москва, Россия*

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

В докладе представлено современное состояние исследований додекаборидов на основе узкозонного полупроводника  $\text{YbB}_{12}$  с сильными электронными корреляциями и переходом металл-изолятор (ПМИ), в которых одновременно активными оказываются зарядовые, спиновые, орбитальные и решеточные степени свободы. Показано, что аномальные свойства соединений  $\text{RB}_{12}$  обусловлены развитием кооперативной динамической ян-теллеровской (ЯТ) неустойчивости ковалентной подрешетки бора, причем ЯТ-эффект обуславливает как структурные искажения борного ковалентного каркаса, так и понижение симметрии ГЦК кристаллической структуры [1]. Скоррелированные ЯТ динамические искажения кубооктаэдров  $\text{B}_{12}$  являются причиной возникновения коллективных мод в оптических спектрах  $\text{RB}_{12}$  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 соединениях [2].

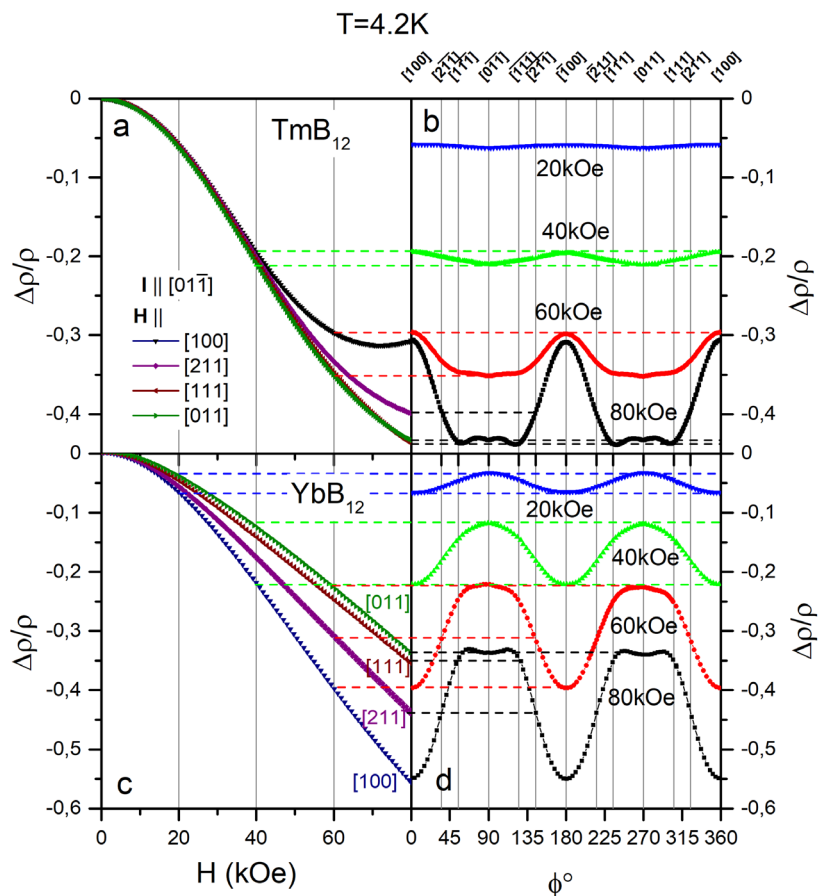


Рис.1. Полевые (а), (с) и угловые (б), (д) зависимости магнетосопротивления  $TmB_{12}$  и  $YbB_{12}$ , соответственно.

Рассматривается механизм, ответственный за появление динамических зарядовых страйпов, и роль эффектов электронного фазового расслоения в возникновении аномальных свойств в немагнитном реперном соединении  $LuB_{12}$ , антиферромагнетиках  $RB_{12}$  (R- Ho, Er и Tm) и узкозонных полупроводниках  $Tm_{1-x}Yb_xB_{12}$ , в которых наблюдается большое количество различных магнитных фаз и фазовых переходов.

Основное внимание уделено обсуждению переходов металл-изолятор в  $YbB_{12}$  и в твердых растворах на основе Yb. Показано, что ПМИ в додекаборидах на основе Yb наблюдаются в условиях нестабильности  $4f$ -электронной оболочки ионов Yb, которая, наряду с ян-теллеровской неустойчивостью борного каркаса, обеспечивает дополнительный канал зарядовых и спиновых флуктуаций. Анализ имеющихся экспериментальных результатов (см., например, рис. 1) приводит к выводу (i) о переориентации направления страйпов в этих соединениях с быстрыми  $4f-5d$  флуктуациями заряда и (ii) о неприменимости модели топологического кондо-изолятора в  $YbB_{12}$ .

Представлены аргументы в пользу возникновения в додекаборидах на основе иттербия колебательно связанных пар Yb-Yb [3], в которых многочастичные электронные состояния оказываются локализованными между ионами иттербия на расстояниях  $\sim 5 \text{ \AA}$ , приводя к диэлектризации свойств  $\text{YbB}_{12}$  [2].

Исследование выполнено при 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. N. Bolotina et al., *Acta Cryst. B* **76**, 1117, **2020**

## КЛАССИФИКАЦИЯ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Сон Л. Д.

*Институт металлургии УрО РАН, г.Екатеринбург  
ldson@yandex.ru*

В докладе обсуждаются типы бинарных систем с эвтектическим равновесием. Их универсальной особенностью является ограниченная растворимость компонентов в жидком состоянии, так что концентрационная зависимость термодинамического потенциала при изменении температуры обеспечивает как минимум одну критическую точку расслоения. Ранее нами было показано, что таких точек может быть и две [1]. Таким образом, это всегда плавная кривая с одним, двумя, или тремя минимумами. Для твердых фаз концентрационная зависимость термодинамического потенциала представляет собой  $\delta$  - образный узкий минимум. Тройная точка эвтектического равновесия представляет собой ситуацию, когда два узких пика и плавная кривая имеют общую касательную (рис.1):



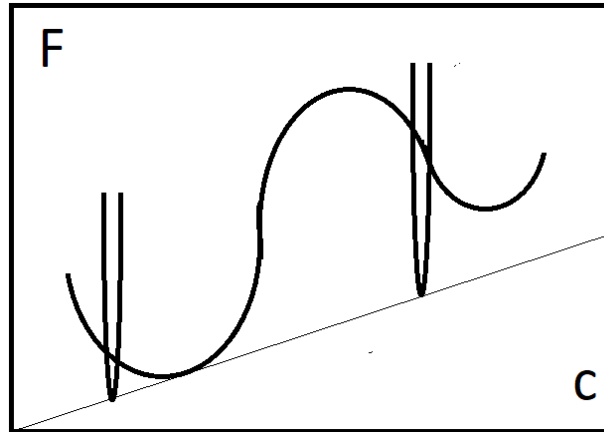


Рис.1. Один из возможных типов эвтектического равновесия

«Зоология» подобных картинок не является обширной, при этом она хорошо соответствует существующим типам аморфизации двойных эвтектических систем

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

Литература

1. L. Son, Dynamics of a lattice gas, JETP Lett. **99** (2014) 689;

## **МАГНЕТИТ: ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ И ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ С УЧЕТОМ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ**

Стегайлов В.В.<sup>1,2,3</sup>, Шутикова М.И.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Объединенный институт высоких температур РАН*

<sup>2</sup>*Московский Физико-Технический Институт (национальный  
исследовательский университет)*

<sup>3</sup>*Национальный исследовательский университет "Высшая школа  
экономики"*

*stegailov@gmail.com*

Магнетит является одним из первых материалов, освоенных нашей цивилизацией. Тем не менее, свойства магнетита до настоящего времени представляют собой много нерешенных проблем и загадок. При температурах ниже температуры Кюри (858 К) магнетит демонстрирует ферромагнитное упорядочение и становится

парамагнитным при более высоких температурах. При температуре перехода Вервея (~125 К) магнетит переходит из низкотемпературной фазы, характеризующейся моноклинной симметрией, в высокотемпературную кубическую фазу обращенной шпинели. Природа стабилизации кубической фазы магнетита выше температуры Вервея, по-видимому, состоит в сложном механизме электрон-фононного взаимодействия, механизм которого все еще недостаточно изучен [1].

Описание магнетита на основе первых принципов все еще не достигло удовлетворительного уровня не только в отношении описания взаимодействия электронной и ионной подсистем, но и в отношении описания сильных электронных корреляций. Стандартным на сегодняшний день подходом является использование метода DFT+U, использующего полуэмпирическую хаббардовскую поправку U для учета сильных электронных корреляций в методе DFT [2].

В данном докладе будут представлены результаты расчетов энергий образования точечных дефектов в кубической фазе магнетита в рамках статических моделей и метода DFT+U. Обсуждаются особенности расчета электронной структуры и релаксации атомной структуры. Показано, что только полупроводниковая модель кубической фазы с небольшой запрещенной щелью и различием зарядового состояния катионов в В-подрешетке ( $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ) дает адекватные энергии образования точечных дефектов. Модель, соответствующая полуметаллическому решению, предсказывает отрицательные энергии образования. Показано, что в структуре низкотемпературной фазы возникает тримеронное упорядочение. Проанализирована релаксация кристаллической матрицы кубической фазы и релаксация локального окружения дефекта. Проведены расчеты энергии образования вакансий и междоузельных атомов, дающие в сумме энергию образования пары Френкеля. Результаты расчетов сравниваются с имеющимися данными по константам равновесия точечных дефектов в магнетите при высоких температурах [3].

## Литература

1. F. Walz, *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**, R285-R340, **2002**
2. М.И. Шутикова, В.В. Стегайлов, *ЖЭТФ*, **160**, 2(8), 1-26, **2021**
3. М.И. Shutikova, V.V. Stegailov, *arXiv:2203.12941*, **2022**

## ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДА НА ФАЗООБРАЗОВАНИЕ В РАСПЛАВАХ Fe85-xCr15Cx (x=10-17) ПРИ НЕБОЛЬШИХ СКОРОСТЯХ ОХЛАЖДЕНИЯ

Стерхова И.В.<sup>1,2</sup>, Камаева Л.В.<sup>1,2</sup>, Щелкачев Н.М.<sup>2</sup>, Ладьянов В.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,  
Ижевск

<sup>2</sup>Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,  
Троицк, Москва  
*irina.sterkhova@mail.ru*

Сплавы системы Fe-Cr-C хорошо известны своей превосходной стойкостью к истиранию, окислению, коррозии и широко используются в условиях различного вида износа в качестве наплавочных материалов [1-3]. Высокая износостойкость высокохромистых сплавов Fe-Cr-C обеспечивается наличием в их структуре большого количества карбидной фазы с высокой твердостью ( $M_7C_3$ ,  $M_3C$  и  $M_{23}C_6$ ). При этом высокой износостойкостью обладают сплавы с карбидами  $M_7C_3$ , которые по сравнению с карбидами цементитного типа имеют в 1,5-2,0 раза более высокую твердость. Известно, что на образование карбидов помимо кинетических процессов может оказывать влияние состояние исходной жидкой фазы, из которой начинается процесс получения сплава. Установление закономерностей между жидким состоянием и конечной структурой материала в области составов, где конкуренция при образовании карбидов максимальна, можно рассматривать как новый эффективный способ улучшения их эксплуатационных свойств. При этом важнейшим физико-химическим параметром, который, с одной стороны, чувствителен к изменениям межатомного взаимодействия в системе, а, с другой, во многом определяет фазовый состав и морфологию твердой фазы, является переохлаждение, в условиях которого начинается кристаллизация расплава.

В связи с этим, в настоящей работе было исследовано влияния содержания углерода от 10 до 17 ат. % на фазовые равновесия при нагреве, а так же процессы кристаллизации сплавов системы Fe-Cr-C при 15 ат.%Cr и их взаимосвязь со структурой переохлажденного жидкого состояния.

Исследования проводили методами термического анализа (дифференциально-сканирующая калориметрия с использованием калориметра DSC 404C Pegasus (Netzsch) – изучение процессов

плавления, дифференциальный термический анализ на высокотемпературном термоанализаторе ВТА-983 – исследование процессов кристаллизации), рентгеноструктурного анализа, металлографии и измерения микротвердости. Для анализа структуры расплавов использовали метод ab initio молекулярной динамики.

Проведенные исследования показали, что диаграмма состояния системы  $Fe_{85-x}Cr_{15}C_x$  ( $x=10-17$ ) в области высоких температур соответствует диаграмме эвтектического типа с эвтектикой между  $\gamma$ -Fe(Cr) и карбидом  $(Fe,Cr)_{23}C_6$  при 14 ат.% С и температуре 1270 °С.

Показано, что в области равновесной эвтектики вблизи 14 ат.% С наблюдается минимум на концентрационной зависимости переохлаждения. При этом кристаллизация расплавов  $Fe_{85-x}Cr_{15}C_x$  ( $x=10-17$ ) не зависимо от состава в условиях охлаждения со скоростью 100°С/мин протекает по неравновесному механизму с образования на первой стадии твердого раствора на основе ГЦК-Fe.

Анализ структуры переохлажденных расплавов  $Fe_{85-x}Cr_{15}C_x$  ( $x=10-17$ ) показал, что неравновесная кристаллизация этих расплавов обусловлена особенностями межатомного взаимодействия в системе. Исследование микротвердости сплавов  $Fe_{85-x}Cr_{15}C_x$  ( $x=10, 14, 17$  ат.%) показало, что увеличением концентрации углерода в сплаве приводит к уменьшению значений микротвердости (от 4297 МПа до 2836 МПа), которое является следствием неравновесной кристаллизации первичного твердого раствора на основе ГЦК-Fe.

Работа выполнена по теме НИР (№121030100001-3) с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН. Анализ атомного ближнего упорядочения в расплавах проводили при поддержке гранта РФФ №18-12-00438.

## Литература

1. A. Jilleh, N. K. Babu, V. Thota, A. L. Anis, M. K. Harun, M. K. Talari, J. Alloys Compd., **857**, 157472, **2021**.
2. G.R.C. Pradeep, A. Ramesh, B. Durga Prasad, International Journal of Engineering Science and Technology. **2(11)**, 6507, **2010**.
3. A. Vereshaka, Adv. Mater. Res., **712-715**, 747, **2013**.

# ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ МАГНИТНЫХ И МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ FE ЛАНГАСИТОВ

Тихановский А.Ю.<sup>1</sup>, Иванов В.Ю.<sup>1</sup>, Кузьменко А.М.<sup>1</sup>, Попов Ю.Ф.<sup>2</sup>, Воробьев Г.П.<sup>2</sup>, Мухин А.А.<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
Москва, Россия  
tikhanovskii@phystech.edu*

Fe-лангаситы это новый класс соединений, привлечший внимание благодаря проявлению магнитоэлектрических свойств. Кристаллическая структура Fe лангаситов относится к пространственной группе R321 и является нецентросимметричной. При температурах ниже точки Нееля ( $T_N \sim 27\text{K}$ ) они упорядочиваются антиферромагнитно в структуру с двойной киральностью (внутриплоскостное треугольное упорядочение спинов  $\text{Fe}^{3+}$ , вращающихся вдоль оси  $c$ ) [1]. В работах [2]-[4] магнитоэлектрический эффект в Fe лангаситах был экспериментально и теоретически исследован, однако его температурные свойства не были описаны. В работе представлено теоретическое описание температурных зависимостей магнитной восприимчивости и электрической поляризации.

Согласно теории [5], восприимчивость спиральной магнитной структуры при  $T < T_N$  и в магнитном поле, направленном перпендикулярно плоскости спирали не зависит от температуры. Слабые магнитные поля, направленные в плоскости магнитной спирали ( $H \parallel b^*$ ) искажают магнитную спираль и индуцируют вторые гармоники, что и определяет величину восприимчивости при низких температурах [5]. В сильных магнитных полях ( $H \parallel b^*$ ), плоскость спирали переориентируется перпендикулярно магнитному полю и возникает электрическая поляризация [4]. Для описания температурной зависимости восприимчивости в поле, направленном в плоскости спирали, мы определяем температурную зависимость поля спин-флоп перехода  $H_{sf}(T)$  (Рис. 1b) из перегиба полевых зависимостей поляризации  $P_{a(b^*)}(H_{b^*(a)})$  при  $T < T_N$ . Тогда  $\chi_{\parallel}(T) = \chi_{\perp} - K(\sigma(T)/H_{sf}(T))^2$  где  $K$  – константа легкоплоскостной анизотропии,  $\sigma(T)$

– нормированная намагниченность, определяемая функцией Бриллюэна.

Используя температурные зависимости ориентации спиральной структуры и индуцированной намагниченности как параметров порядка [4], которые зависят от  $H_{sf}(T)$ ,  $\sigma(T)$  и  $\chi(T)$ , выполнено моделирование температурных зависимостей электрической поляризации при различных ориентациях магнитного поля (Рис. 1а). Электрическая поляризация  $P_{a(b^*)}$  определяется отклонением спиральной структуры от базисной плоскости (обратное взаимодействие Дзялошинского-Мория) и квадратичным вкладом от индуцированной намагниченности  $M_y M_z$  ( $-M_x M_z$ ) противоположного знака (одноионный вклад). Значение поля спин-флоп перехода быстро возрастает вблизи температуры Нееля, что приводит к уменьшению отклонения спирали. Таким образом, вклад от обратного взаимодействия Дзялошинского-Мория уменьшается, и в парамагнитной области электрическую поляризацию характеризует только одноионный вклад.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 22-42-05004).

#### Литература

1. K. Marty, Phys. Rev. Lett., **101**, 247201, **2008**
2. N. Lee, Appl. Phys. Lett, **104**, 072904, **2014**
3. H. Narita, Phys. Rev. B, **94**, 094433, **2016**
4. A. Yu. Tikhonovskii, Phys. Rev. B. **105**, **2022**
5. T. Nagamiya, Solid State Phys. **20**, 305 **1968**

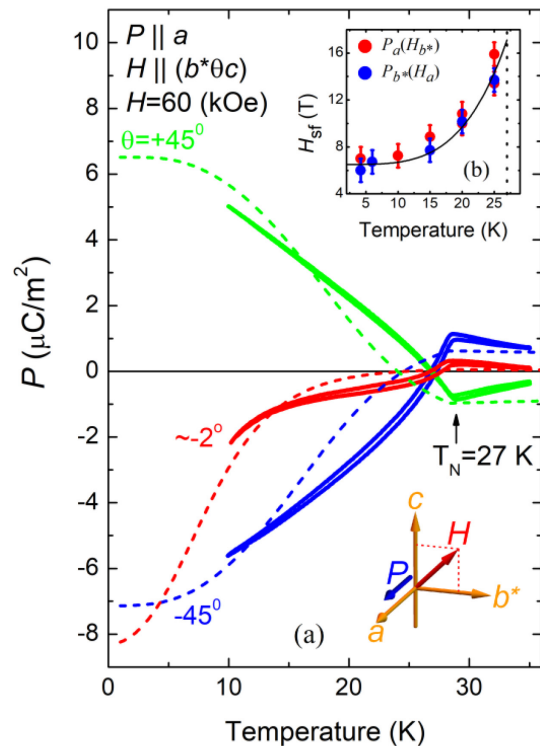


Рис. 1. а) Температурная зависимость электрической поляризации  $P_a$ . Сплошные линии – эксперимент, пунктир – теория. б) Температурная зависимость поля спин-флоп перехода.

# ЭКСИТОННЫЙ МЕХАНИЗМ ПЛАЗМЕННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ПЛОТНОМ ФЛЮИДЕ ВОДОРОДА: АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ НА ОСНОВЕ НОВОЙ ТЕОРИИ

Федоров И.Д.<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  
(национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет

"Высшая школа экономики"

*ilya.d.fedorov@phystech.edu*

Плазменный фазовый переход, при котором разогретый плотный флюид водорода переходит в плазменное проводящее состояние при давлениях порядка 20-300 ГПа и температурах в 1000-5000 К является предметом активных научных исследований последние несколько десятилетий (последние обзоры [1-3]). Использование различных экспериментальных методик до сих пор не привело к получению надежных согласующихся между собой результатов и, несмотря на многочисленные попытки, теоретические методы пока не смогли однозначно объяснить имеющиеся расхождения, а также микроскопическую природу механизма перехода флюида водорода в проводящее состояние.

В нашей работе [4-5], благодаря использованию методов неадиабатической динамики теории функционала плотности с моделированием возбужденного состояния, обнаружен механизм перехода молекулярного флюида в плазму, связанный с возникновением экситонов и диссоциацией электрон-дырочных пар. На основе данного механизма мы описываем несколько этапов перехода водорода из молекулярного непроводящего состояния в плазму. В рамках данного подхода удается объяснить многие наблюдаемые в недавних экспериментах эффекты, а также расхождения результатов различных экспериментов между собой.

## Литература

1. M. Zaghou, R.J. Husband, I.F. Silvera, Phys. Rev. B, **98**,104102, **2018**
2. M. Houtput, J. Tempere, I.F. Silvera, Phys. Rev. B, **100**, 134106, **2019**
3. R. Helled, G. Mazzola, R. Redmer, Nat. Rev. Phys., **2.10**, 562-574, **2020**
4. I.F. Silvera, R. Dias, Advances in Physics, **6.1**, 1961607, **2021**

5. Г.Э. Норман, И.М. Сайтов, УФН, **191.11**, 1153-1186, **2021**  
6. I. Fedorov, N. Orekhov, V. Stegailov, Phys. Rev. B, **101**, 100101, **2020**  
7. И. Федоров, В. Стегайлов, Письма в ЖЭТФ, **113**, 396-398, **2021**

## СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ СПЕКАНИЕМ АЛМАЗНЫХ ПОРОШКОВ С ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Филоненко В.П.

*Институт физики высоких давлений РАН, Москва, г. Троицк  
filv@hppi.troitsk.ru*

В работе рассмотрены возможности практического использования наноразмерных алмазов с функционализированной фтором поверхностью для синтеза в условиях высоких давлений и температур сверхтвердых композитов. Базовые смеси готовили из микропорошков с размерами  $\approx 10$  мкм и нанопорошков с размерами около 90 нм (Рис. 1а). Спекание проводили при давлениях 7.5–8.0 ГПа и температурах 1500-1700°C в камерах высокого давления типа тороид. Установлен оптимальный состав смеси, в которой должно быть 85% микроалмазов и 15% наноалмазов.

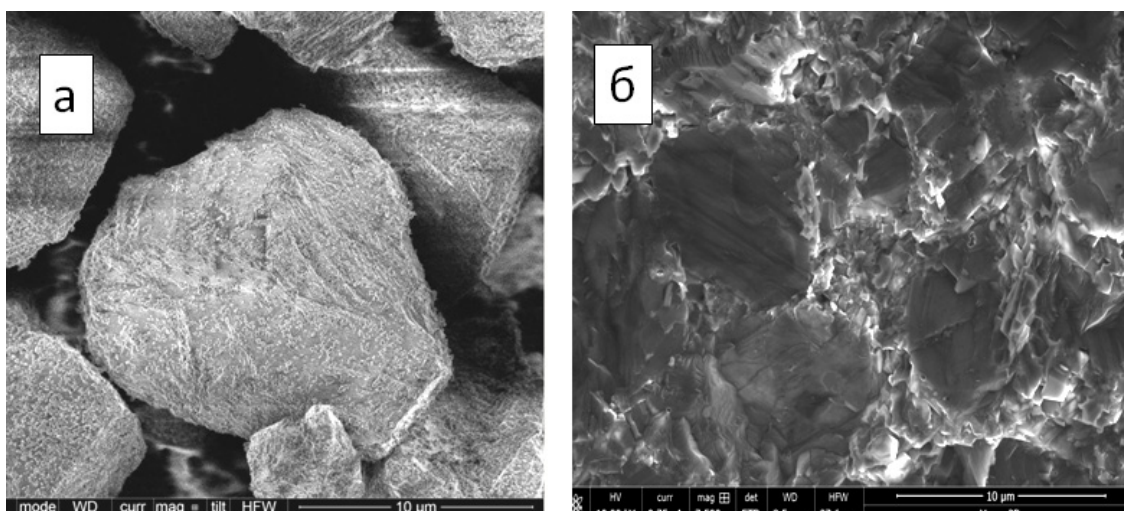


Рис. 1. (а) - исходная смесь фторированных нано- и микроалмазов, (б) - скол алмазного композита со связкой AlCo

Модельные эксперименты по спеканию фторированных 90 нм алмазов с добавкой алюминия показали, что их размеры увеличиваются до субмикронных, а между кристаллами формируются качественные границы раздела [1]. Быстрый массоперенос углерода и



образование алмазного каркаса связано с наличием в реакционном объеме флюидных фаз. Модуль Юнга композитов на основе фторированных смесей микро- и наноалмазов с алюминием достигает 750 ГПа. Хороший уровень их физико-механических и эксплуатационных характеристик дополняется высокой термической устойчивостью, поскольку связующей фазой является не металл, а карбид алюминия. Однако, наличие включений  $Al_4C_3$  может приводить к неконтролируемой деградации свойств композитов из-за химического взаимодействия карбида с водой.

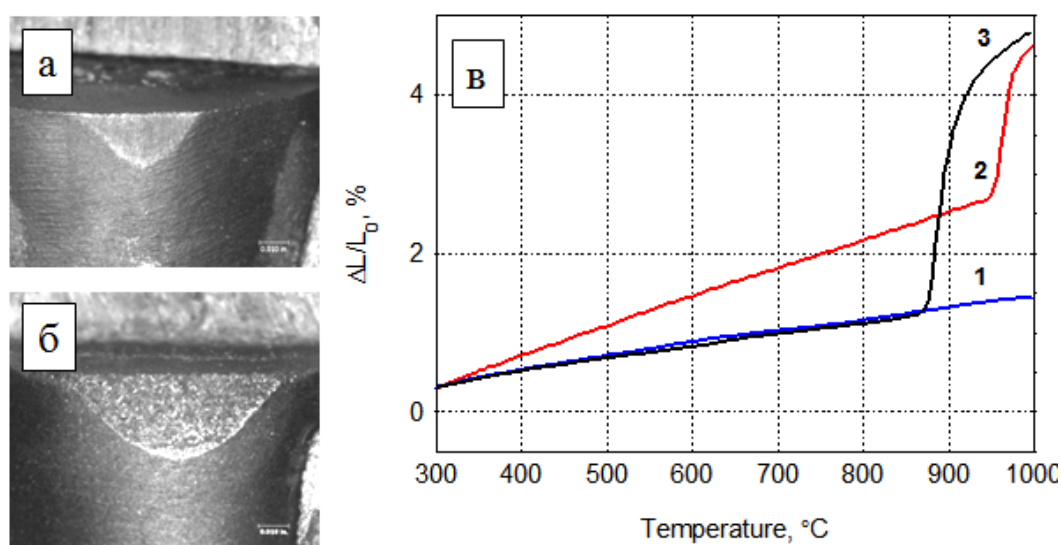


Рис. 2. Пятна износа после шести циклов точения белого гранита: (а) - экспериментальный композит со связкой  $AlCo$ , (б) - композит компании US Synthetic; (в) - изменение геометрических размеров композитов при нагреве в аргоне: 1 – композит со связкой  $Al_4C_3$ , 2 – композит со связкой  $AlCo$ , 3 – композит компании US Synthetic

Для устранения этого недостатка использовали добавку к фторированной смеси алмазов алюминия и кобальта. Модуль Юнга таких композитов составляет около 850 ГПа, а связующая фаза представляет собой интерметаллид  $AlCo$ . На основании большой серии экспериментов установлено, что оптимальной является добавка к алмазам 3 мас.% алюминия и 9 мас.% кобальта. Композиты, спеченные из таких смесей, имеют отличную износостойкость и повышенную термическую устойчивость (Рис. 2). При точении белого гранита площадь пятен износа у экспериментальных материалов в несколько раз меньше, чем у премиальных коммерческих композитов.

Работа выполнена в рамках программы Министерства науки и высшего образования РФ FFUW-2021-0003.

## Литература

1. Khabashesku V.N., Filonenko V.P., Bagramov R.Kh., Anokhin A.S., Kukueva E.V., Kuznetsov O.V. *Diam. Relat. Mater.* 2021, 112, 108247.

## **ПЕРЕХОД В СТЕКЛО В МОНОАТОМНЫХ СИСТЕМАХ: РАЗМЫВАНИЕ ОДНОЙ СТРУКТУРЫ ИЛИ КОНКУРЕНЦИЯ СТРУКТУР**

Фомин Ю.Д., Циок Е.Н., Рыжов В.Н. и Бражкин В.В.  
*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН*  
*fomin314@mail.ru*

Обсуждены свойства многогранников Вороного в нескольких одноатомных стеклообразующих системах. Показано, что в разных системах возникает один из двух сценариев: размывание свойств многогранников Вороного или возникновение нескольких типов многогранников. Второй механизм аналогичен механизму перехода в стекло в бинарных сплавах, что показано сравнением результатов с результатами для смеси Коба-Андерсона.

Работа опубликована в статье [1].

Исследование выполнено при поддержке гранта Президента РФ для поддержки молодых докторов наук МД-6103.2021.1.2.

## Литература

1. Ю.Д. Фомин, Е.Н. Циок, В.Н. Рыжов и В.В. Бражкин, *Журнал физической химии* (принято в печать) (2022).

# ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ В МОДЕЛИ ПЛЁНКИ FeO: РАВНОВЕСНЫЕ КОНЦЕНТРАЦИИ, ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ И ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ

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*

Точечные дефекты оказывают значительное влияние на различные свойства твердых тел. От их концентрации и подвижности зависят электропроводность, процессы самодиффузии и параметры фазовых переходов в кристаллах. Хотя концентрацию дефектов при данной температуре можно получать непосредственно из молекулярной динамики [1], однако этот метод требует огромных вычислительных ресурсов и делает почти невозможным использование сложных потенциалов или *ab initio* расчётов.

С другой стороны, равновесные концентрации можно описать в терминах энергии образования дефектов [2], что с учётом химического потенциала во внешней среде позволяет получить их из статических расчётов. Однако возможный диапазон химических потенциалов может быть весьма велик [3], что приводит к вопросу о выборе корректного референсного состояния.

В данной работе для анализа и сопоставления двух методов используется модельная система FeO с межатомным взаимодействием, задаваемым потенциалом Терсоффа [4]. Будут сопоставлены результаты выхода дефектов на равновесие в молекулярной динамике в виде соответствующих энергий образования дефектов и энергии образования, полученные из молекулярной статики с различными вариантами учета внешнего химического потенциала.

## Литература

1. G.S. Smirnov, V.V. Stegailov, J. Phys. Cond. Matter, **31**, 235704, **2019**
2. C. Freysoldt, et al., Rev. Mod. Phys., **86**, 253, **2014**
3. K. Balasubramanian, S.V. Khare, D. Gall, Acta Mater., **159**, 77, **2018**
4. J. Byggmästar, et al., J. Phys. Condens. Matter, **31**, 215401, **2019**

# ПОСТРОЕНИЕ СЕМЕЙСТВА СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ГРУППЫ ЖИДКИХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

Хабибуллин Р. А., Мокшин А. В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,*

*Институт физики, г. Казань, Россия*

*roman.khabibullin@outlook.com*

Щелочные металлы имеют широкое применение в различных отраслях современной промышленности и энергетики. Жидкие щелочные металлы могут быть использованы в качестве теплоносителей в ядерных реакторах и ракетных двигателях благодаря высокой теплоемкости и теплопроводности, а также благодаря тому, что их жидкая фаза реализуется вдоль широкого диапазона температур. В связи с этим высокий интерес представляет задача разработки потенциалов межчастичного взаимодействия для данной группы металлов.

Исходя из предположения об универсальности межчастичных взаимодействий в жидких щелочных металлах, мы использовали существующий парный потенциал для жидкого лития [1] в качестве основы для разрабатываемого семейства потенциалов. Методами машинного обучения получены сферически-симметричные потенциалы для жидкого натрия, калия и рубидия. Восстановление потенциалов выполнялось по экспериментальным структурным данным неупругого рассеяния рентгеновских лучей [2]. Все полученные потенциалы с высокой точностью воспроизводят экспериментальную структуру. Также нами рассматривается задача восстановления потенциалов по экспериментально измеряемым транспортным характеристикам — вязкости [3] и коэффициенту самодиффузии [4] вблизи линии насыщения.

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00022-П) и Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 20-1-2-38).

## Литература

1. L. E. Gonzalez, D. J. Gonzalez, M. Silbert, J. A. Alonso, J. Phys.: Condens. Matter, **5**, 4283, 1993

2. Y. Waseda, McGraw-Hill, 1980
3. Н. Б. Варгафтик, Наука, 1972
4. S. J. Larsson, C. Roxbergh, A. Lodding, Phys. Chem. Liq., 3, 137, 1972

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ РАСПЛАВОВ Al-Cu С ПОМОЩЬЮ ПОТЕНЦИАЛОВ ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

Хазиева Е.О.<sup>1</sup>, Типеев А.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*

В последние несколько лет достигнут революционный прогресс в построении классических межатомных потенциалов взаимодействия методами машинного обучения [1-6]. Основная идея такого подхода – аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью некоторой многочастичной функции общего вида (например, многослойной нейронной сети) используя эталонные значения, полученные с помощью *ab initio* расчетов. Классическая молекулярная динамика с такими потенциалами позволяет получить результаты, сравнимые по точности с *ab initio* методами при на 3-4 порядка меньших вычислительных затратах.

Несмотря на огромный потенциал и привлекательность перечисленных методов, многие ключевые вопросы, касающиеся методов эффективного построения потенциалов машинного обучения и их применения для решения конкретных задач, являются нерешенными. В частности, ключевыми проблемами являются выбор оптимальной модели машинного обучения, разработка эффективных методов генерирования обучающего датасета, оценка точности разработанных моделей.

Здесь мы рассматриваем вышеупомянутые вопросы для бинарных сплавов Al-Cu, которые являются удобными модельными системами по нескольким причинам. Во-первых, они представляют собой смеси металлов с различными электронными конфигурациями: *p*-металл (Al) и благородный *s*-металл (Cu), и потому демонстрируют сложное химическое взаимодействие между компонентами, которое вызывает нетривиальное поведение. Например, в данной системе

образуется ряд сложных интерметаллических фаз и наблюдается немонотонное поведение физико-химических свойств расплавов при изменении состава. Во-вторых, как сами бинарные сплавы Al-Cu, так и соответствующие чистые компоненты Al, Cu, представляют самостоятельный фундаментальный интерес (как модельные системы) и большое практическое значение.

Для разработки потенциалов глубокого обучения (DP – Deep Potentials) для расплавов Al-Cu мы используем пакет DeePMD-kit [7], в котором в качестве регрессионной модели используется многослойные нейронные сети прямого распространения. Для оптимизации значений гиперпараметров нейросетей, а также схем обучения, мы построили десять вариантов потенциала, которые существенно отличаются по своей точности и производительности. Анализируя разработанные DP, мы выбрали оптимальную модель и тщательно изучили, как она описывает структурные, динамические и термодинамические свойства расплавов Al-Cu в сравнении с результатами *ab initio* молекулярной динамики (AIMD), экспериментальными данными, а также модифицированной моделью погруженного атома (MEAM). Мы показываем, что DP очень хорошо воспроизводит *ab initio* данные для энергий, сил и вириалов, а также функции радиального распределения и функции автокорреляции скорости, извлеченные из AIMD. Экспериментальные данные для плотности и структурных характеристик расплавов также воспроизводятся с хорошей точностью.

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

## Литература

1. A. Singraber, J. Behler, C. Dellago, J. Chem. Theory Comput., 15, 1827 (2019)
2. L. Zhang, J. Han, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Lett. 120, 143001 (2018)
3. L. Zhang, D.-Y. Lin, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Materials 3, 023804 (2019)
4. F. Karsai, G. Kresse, M. Bokdam, Phys. Rev. Lett. 122, 225701, (2019)
5. T. Mueller, A. Hernandez, and C. Wang, J. Chem. Phys. 152, 050902 (2020)
6. Y. Zhang, H. Wang, W. Chen, J. Zeng, L. Zhang, H. Wang, and W. E, Comput. Phys. Commun., 107206 (2020)

7. Wen, T., Zhang, L., Wang, H., Weinan, E., Srolovitz, D. J. Deep potentials for materials science. *Materials Futures*, 1, 022601, (2022).

## МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА ВОДЫ

Хуснутдинов Р.М.<sup>1,2,b</sup>, Хайруллина Р.Р.<sup>1,a</sup>,

<sup>1</sup>*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*

<sup>2</sup>*Удмуртский федеральный научный центр УрО РАН, Ижевск, Россия*

<sup>a</sup>*khrm@mail.ru*, <sup>b</sup>*raniya-art@mail.ru*

Представлены результаты исследования микроскопических коллективных возбуждений в воде, полученные с помощью моделирования молекулярной динамики на основе огрубленной (моноатомной) ML-mW-модели потенциала межмолекулярного взаимодействия [1]. Данная модель потенциала является улучшенным вариантом mW-модели (mW – model of water), где оптимизация параметров взаимодействия выполнялась с помощью современных методов машинного обучения [2]. Отметим, что этот модельный потенциал корректно воспроизводит фазовую диаграмму воды в широкой области термодинамических параметров, температуру максимальной плотности, значения теплоемкости и сжимаемости в области переохлажденной жидкости, а также ряд термодинамических аномалий, наблюдаемых для воды. Моделирование воды выполняется в изотермически-изобарическом (NpT-) ансамбле при температуре  $T=300$  К и внешнем давлении  $p=1.0$  атм. Система состояла из 32000 молекул, расположенных в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Для стабилизации системы использовался термостат и баростат Нозе-Гувера с параметрами релаксации 10.0 и 100.0 фс соответственно.

Рассчитанные спектры динамического структурного фактора и спектральные плотности временных корреляционных функций продольного и поперечного потоков обнаруживают наличие распространяющихся коллективных возбуждений продольной и поперечной поляризации в воде для широкой области значений волновых чисел (см. рис. 1). Анализ спектров позволяет предположить, что наблюдаемые аномалии в высокочастотной коллективной динамике обусловлены релаксационными процессами, ответственными за (i) появление распространяющихся поперечных

коллективных мод на высоких частотах, (ii) переход от нормального звука к быстрому и (iii) явлением замешивания продольных и поперечных коллективных мод при больших значениях волновых чисел.

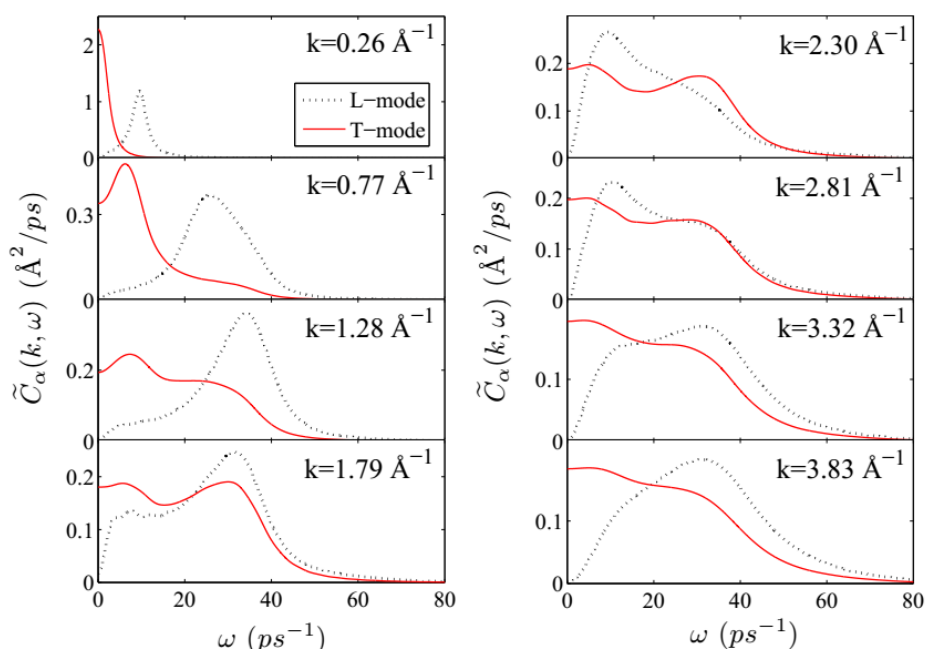


Рис. 1. Спектральные плотности временной корреляционной функции продольного и поперечного потоков в воде при температуре  $T=300$  К.

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

## Литература

1. H. Chan, M.J. Cherukara, B. Narayanan, T.D. Loeffler, C. Benmore, S.K. Gray, S. Sankaranarayanan, Nat. Commun. **10**, 379 (2019).
2. V. Molinero, E.B. Moore, J. Phys. Chem. B **113**, 4008 (2009).
3. F. Mallamace, C. Corsaro, H.E. Stanley, PNAS **110**, 4899 (2013).



# ВЛИЯНИЕ ЖЕСТКОСТИ И ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ МЕЖЧАСТИЧНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОЛЛОИДНЫХ СИСТЕМ В КОНИЧЕСКИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ ПОЛЯХ

Циок Е.Н.<sup>1</sup>, Фомин Ю.Д.<sup>1</sup>, Гайдук Е.А.<sup>1</sup>, Тареева Е.Е.<sup>1</sup>, Рыжов В.Н.<sup>1</sup>,  
Широкова А.А.<sup>1,2</sup>, Кушнир И.А.<sup>1,2</sup>, Денисенко И.Р.<sup>1,2</sup>, Крючков Н.П.<sup>2</sup>,  
Юрченко С.О.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений РАН, Москва, Троицк*

<sup>2</sup>*МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва*

*elena.tsiok@gmail.com*

Природа двумерного (2D) плавления является одной из наиболее интригующих проблем физики конденсированного состояния. Несмотря на большие усилия исследователей в изучении поведения 2D систем, в этой области до сих пор остается большое количество белых пятен.

Так, в отличие от трехмерного случая, где плавление всегда происходит посредством стандартного перехода первого рода, для микроскопического описания 2D плавления известны несколько сценариев [1, 2]: (i) теория Березинского-Костерлица-Таулесса-Хальперина-Нельсона-Янга (БКТХНЯ), в рамках которой 2D плавление происходит посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой; (ii) плавление посредством перехода первого рода, например, в результате диссоциации дисклинационных квадруполей; (iii) переход твердое тело - гексатическая фаза происходит посредством непрерывного перехода типа Березинского-Костерлица-Таулеса (БКТ), а переход гексатическая фаза - изотропная жидкость – посредством перехода первого рода.

Известно, что магнитные и электрические конически-вращающиеся поля способны индуцировать сложные многомасштабные взаимодействия. Однако детальное исследование структур при разных углах прецессии находится на стадии начального развития.

В данной работе методом молекулярной динамики проведено исследование фазовой диаграммы и сценариев плавления в двумерной системе с эффективным многочастичным потенциалом, выведенным из анализа поведения коллоидных частиц во внешнем вращающемся магнитном поле. Полученный потенциал имеет

сложный аналитический вид и включает двухчастичное и трехчастичное взаимодействие. Для построения фазовых диаграмм и анализа сценариев двумерного плавления была использована разработанная в наших предыдущих работах методика, базирующаяся на вычислении уравнений состояния, расчетах корреляционных функций трансляционного и ориентационного параметров порядка. Было получено, что фазовая диаграмма, в зависимости от угла прецессии поля, может содержать переход газ – жидкость, газ – кристалл, критическую и тройную точки, на линии плавления треугольного кристалла обнаружена трикритическая точка, в которой происходит смена сценария плавления. Было обнаружено, что угол прецессии, подобно радиусу дальнего действия в обобщенном  $m$ -потенциале Леннарда-Джонса [3], влияет на фазовую диаграмму и сценарий плавления.

Работа была выполнена при поддержке Российского научного фонда (Грант No 19-12-00092).

#### Литература

1. V. N. Ryzhov et al., Physics-Uspekhi, **60**, 857, **2017**
2. V. N. Ryzhov et al., Physics-Uspekhi, **63**, 417, **2020**
3. E. N. Tsiok et al., J. Chem. Phys., **156**, 114703, **2022**

### **САМОСБОРКА МАГНИТНЫХ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВРАЩАЮЩЕМСЯ КОНИЧЕСКОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УГЛАХ ПРЕЦЕССИИ**

Широкова А.А.<sup>1,2</sup>, Симкин И.В.<sup>1</sup>, Либет П.А.<sup>1</sup>, Яковлев Е.В.<sup>1</sup>,  
Юрченко С.О.<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, st.yurcheko@mail.ru*

Исследования систем с управляемым межчастичным взаимодействием открывает большие возможности в изучении фундаментальных явлений и в создании новых функциональных материалов. На сегодняшний день перспективными методами управления явлением самосборки являются использование внешних вращающихся электрических [1-3] или магнитных [4] полей,

например, для изучения коллективной динамики [5] и фазовых переходов [6, 7].

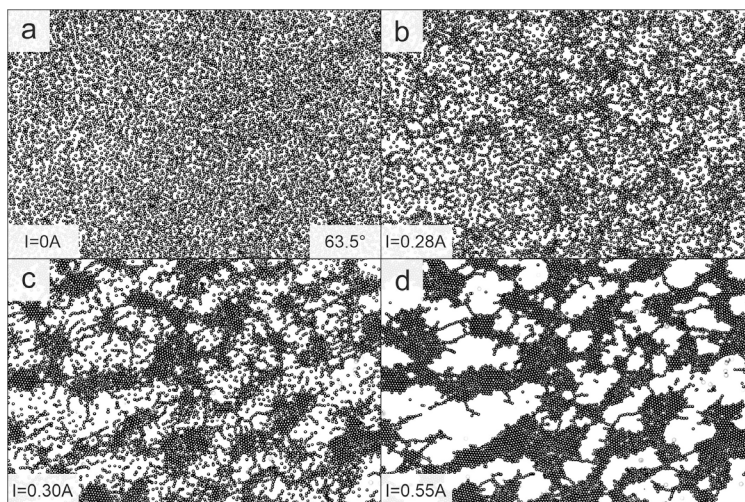


Рис. 1 Фото коллоидной системы в конических полях при фиксированном значении угла прецессии  $63,5^\circ$

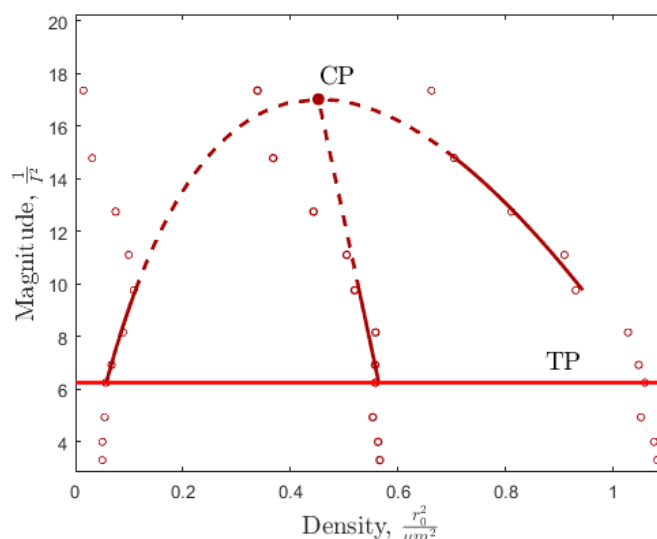


Рис 2. Экспериментальная фазовая диаграмма коллоидной системы во вращающемся магнитном коническом поле с углом прецессии вектора магнитной индукции  $63,5^\circ$

Актуальной задачей является изучение процесса самосборки коллоидных суспензий во внешних конических магнитных полях при изменении угла прецессии общего вектора магнитной индукции.

В настоящей работе для этой цели использовалась двумерная коллоидная система парамагнитных частиц диоксида кремния диаметром 2.47 мкм в сольвенте (деионизированная вода) во внешних вращающихся конических магнитных полях, создаваемых тремя

ортогональными парами катушек: двумя парами горизонтальных и одной парой вертикальных катушек.

Серия экспериментов включала в себя наблюдение и регистрацию данных о структуре коллоидных систем при последовательном изменении значения магнитуды и угла прецессии магнитной индукции (Рис.1). Угол прецессии задавался соотношением между значениями силы тока на вертикальных и горизонтальных катушках. В ходе исследования были проведены эксперименты для следующих значений угла прецессии вектора магнитной индукции:  $90^\circ$ ;  $79,2^\circ$ ;  $72,3^\circ$  и  $63,5^\circ$ .

В результате работы были построены фазовые диаграммы для коллоидных систем во вращающемся коническом поле при различных углах прецессии вектора магнитной индукции. На Рис. 2 показана фазовая диаграмма для коллоидной системы при угле прецессии вектора магнитной индукции  $63,5^\circ$ .

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-12-00092 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э. Баумана.

#### Литература

1. E.V. Yakovlev et al., J. Phys.: Conf. Ser., **1135**, 012039, **2018**
2. E.V. Yakovlev et al., J. Colloid Interface Sci., **608**, 1, **2022**
3. E.V. Yakovlev et al., Sci. Rep., **7**, 13727, **2017**
4. Li, D. D. et al., Comput. Part. Mech, **9**, 2, 315-333, **2022**
5. Klapp S. H. L., Curr. Opin. Colloid Interface Sci., **21**, 76–85, **2016**
6. Du, D. et al, Soft Matter **13**, 8, 1548-1553, **2017**
7. Ryzhov V. N. et al., Phys.-Uspekhi., **60**, 9, 857, **2017**

### **МАЙОРАНОВКИЕ УГЛОВЫЕ МОДЫ В ДВУМЕРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ**

Аксенов С. В., Злотников А.О., Федосеев А. Д., Шустин М. С.  
*Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения  
Российской академии наук, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск  
mshustin@yandex.ru*

Одним из актуальных направлений физики конденсированного состояния является изучение низкоразмерных топологических

сверхпроводников и поиск в них майорановских мод [1]. Такие состояния локализуются на структурных или топологических дефектах материалов и являются устойчивыми по отношению к внешним локальным возмущениям. В данном отношении двумерные топологически сверхпроводники высокого порядка (ТСВП) представляют в настоящее время особенный интерес. Для них локализация майорановских состояний в реальном пространстве реализуется на углах системы с открытыми границами, формируя т.н. майорановские угловые моды (МУМ) Более того, в энергетическом пространстве такие моды отделены существенной щелью, величина которой определяется внутренними взаимодействиями системы. Описанные особенности определяют перспективу использования состояний с МУМ в качестве кубитов, для которых возможна реализация операций «плетения» волновых функций [2].

В настоящее время предложенные механизмы реализации МУМ основывались на моделях, в которых пренебрегалось кулоновским взаимодействием электронов [3]. Между тем, в реальных материалах такое взаимодействие всегда присутствует и его наличие может приводить к изменению топологических состояний и даже появлению новых топологических классов в системе [4]. Поэтому анализ эффектов влияния межэлектронных взаимодействий на условия реализации МУМ в ТСВП в настоящее время представляет интерес.

Мы исследовали модификацию условий возникновения возбуждений майорановского типа в ТСВП при учете в последних локальных кулоновских взаимодействий. Микроскопическое описание ТСВП проводилось в рамках обобщения двухзонной модели на квадратной решетке [5], в которой дополнительно учитывалось орбитальное расщепление одноионных уровней ( $\Delta\varepsilon$ ), хаббардовское ( $U$ ) и межузельное ( $V$ ) отталкивание электронов:

$$H = H_0 + H_1 ;$$

$$H_0 = \sum_{\substack{f,\eta=A,B \\ \sigma=\uparrow,\downarrow}} (-\mu + \eta\Delta\varepsilon) c_{f\eta\sigma}^+ c_{f\eta\sigma} + U \sum_{f,\eta=A,B} n_{f\eta\uparrow} n_{f\eta\downarrow} + V \sum_{f,\sigma\sigma'=\uparrow,\downarrow} n_{fA\sigma} n_{fB\sigma'},$$

$$H_1 = \sum_{\langle fm \rangle_x \sigma \eta} t_x \eta c_{f\eta\sigma}^+ c_{m\eta\sigma} + \sum_{\langle fm \rangle_y \sigma \eta} t_y \eta c_{f\eta\sigma}^+ c_{m\eta\sigma} + \\ + i\alpha \sum_{\substack{\langle fm \rangle \\ \eta\eta'\sigma\sigma'}} \left( \vec{\sigma}^{\sigma\sigma'} \times \vec{d}_{fm} \right)_z c_{f\eta\sigma}^+ c_{m\eta'\sigma'} + \sum_{\langle fm \rangle} \Delta_1 c_{f\eta\uparrow}^+ c_{m\eta\downarrow}^+ + h.c.,$$

Для такой системы в обобщенном приближении среднего поля получены выражения, позволяющие описывать формирование краевых состояний в несверхпроводящем случае. Затем, путем расчета матричных элементов от слагаемых гамильтониана, описывающих сверхпроводимость, на базе таких состояний найдена зависимость эффективной (дираковской) массы квазичастиц и построена топологическая фазовая диаграмма. Это позволило на полуаналитическом уровне описать влияние кулоновского взаимодействия на условия формирования МУМ в системе. Показано, что учет кулоновских взаимодействий на среднеполевом уровне приводит к ренормировкам энергетических параметров гамильтониана (1), а также к индуцированию эффективных компонент магнитного поля, поперечных оси квантования. Последние модифицируют топологическую фазовую диаграмму лишь посредством изменения актуальных компонент квазиимпульса краевых мод для системы без сверхпроводимости.

Результаты получены при поддержке РФФ № 22-22-20076.

#### Литература

1. V.V. Val'kov, M.S. Shustin, S.V. Aksenov, A.O. Zlotnikov, A.D. Fedoseev, V.A. Mitskan and M.Yu. Kagan, Phys. Usp. **65**, 2, **2022**
2. W.A. Benalcazar, B.A. Bernevig, T.L. Hughes. Science **357**, 61, **2017**
3. A.O. Zlotnikov, M.S. Shustin, A.D. Fedoseev. J. Sup. Nov. Mag. **34**, 3053, **2021**
4. K. Kudo K., T. Yoshida, Y. Hatsugai. Phys. Rev. Lett. **123**, 196402, **2019**
5. Q. Wang, C.-C. Liu, Y.-M. Lu and F. Zhang, Phys. Rev. Lett. **121**, 186801, **2018**

### **ВЛИЯНИЯ ГОСТЕВЫХ МОЛЕКУЛ НА СТАБИЛЬНОСТЬ ГИДРАТА С КОНФИГУРАЦИЕЙ SI**

Юнусов М.Б.<sup>1,a</sup>, Хуснутдинов Р.М.<sup>1,2,b</sup>

<sup>1</sup> *Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики, кафедра вычислительной физики, Россия*

<sup>2</sup> *Удмуртский федеральный научный центр УрО РАН, Россия*  
*<sup>a</sup>mikhmatadbek@mail.ru, <sup>b</sup>khrm@mail.ru*

Природные газогидраты вызывают неподдельный интерес среди исследователей, это связано: во-первых, с использованием гидратов в

качестве перспективных источников углеводородной энергии [1], а во-вторых возможностью применения таких молекулярных систем в качестве резервуаров для хранения водорода [2]. Гидраты представляют собой кристаллические соединения, образованные молекулами воды. Кристаллическая решетка имеет полости, в которых могут заключаться молекулы газов. Термодинамические свойства и кинетика образования гидратов хорошо изучены. Однако, наблюдается недостаток исследований энергетических и электронных свойств гидратных систем с точки зрения первопринципных расчетов. В данной работе в рамках теории функционала плотности [3] были исследованы некоторые аспекты структурной стабильности газовых гидратов с решеткой sI.

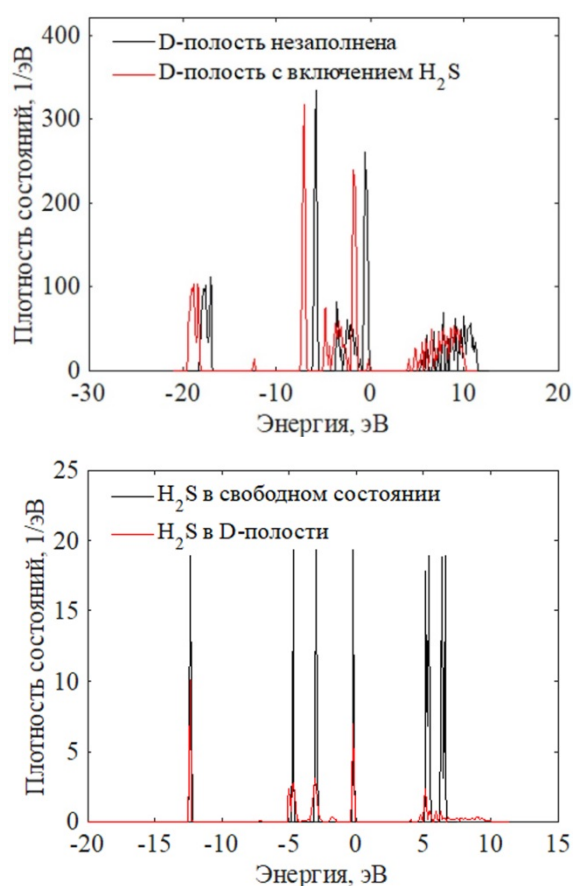


Рис. 1. Слева – плотности электронных состояний для гидрата sI, в присутствии и отсутствии молекулы H<sub>2</sub>S в D-полости. Справа - плотность электронных состояний одиночной молекулы H<sub>2</sub>S и молекулы в D-полости гидрата.

Во-первых, обнаружено, что в присутствии молекул газа, узлы молекулярной полости испытывают отталкивание от гостевой молекулы за счет сил Ван-дер-Ваальса вероятно, приводит к стабилизации геометрической структуры гидрата. Далее для таких газов, как  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{Xe}$  и  $\text{H}_2\text{S}$ , были рассчитаны энергии с окружающей полостью в гидрате. Кроме того, произведена оценка влияния гостевых молекул на устойчивость гидратов с точки зрения плотности электронных состояний (рис. 1). Далее, исследована зависимость энергии связи от ориентации молекул газа, находящихся в не сферичной Т-полости. Для молекулы  $\text{C}_2\text{H}_6$  продольное расположение в Т-полости оказалось выгоднее, чем поперечное, на  $\sim 0.03$  эВ, что составляет  $\sim 8\%$  от энергии связи. Продольное расположение  $\text{CO}_2$  в Т-полости оказалось выгоднее, чем поперечное на  $\sim 0.01$  эВ, что составляет  $\sim 3\%$  от энергии связи (рис. 2). В свою очередь, форма D-полости является близкой к сферической. Ориентация молекул с формой, близкой к сферической незначительно отражается на энергии связи.

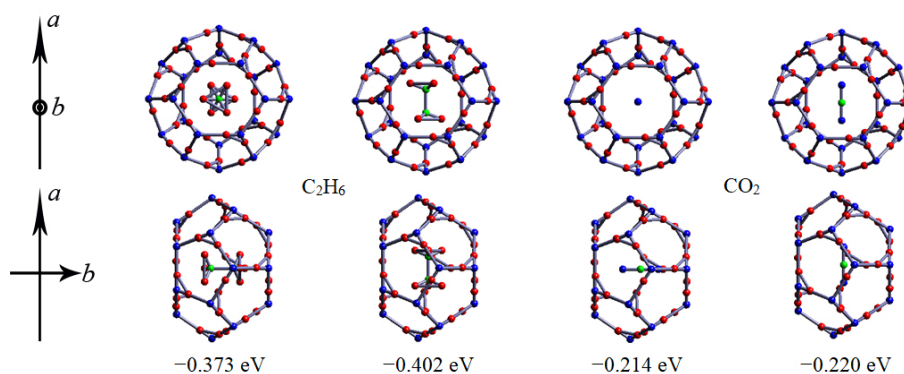


Рис. 2. Ориентации  $\text{C}_2\text{H}_6$  и  $\text{CO}_2$  в Т-полости и соответствующие энергии связи.

### Благодарности

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

### Литература

1. Sloan E.D., Koh C.A. // Clathrate Hydrates of Natural Gases, CRC Press, Taylor & Francis
2. Su F., Bray C.L. et al. // Adv. Mater. 2009. **21**. №. 23. P. 2382.
3. Kresse G., Furthmuller J. // Phys. Rev. B. 1996. **54**. P. 11169.



# ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАЗБАВЛЕННОЙ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д.

*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург*  
*daria.iasinskaia@urfu.ru*

Низкоразмерные системы изинговских спинов широко используются для описания реальных магнитных материалов, способных выступать в качестве частей устройств хранения и обработки информации с высокой плотностью [1], а также для построения моделей квантовых и классических жидкостей, бинарных сплавов, разбавленных магнетиков, гетерометаллических соединений на молекулярной основе, соединений с дальнедействующими взаимодействиями. 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 магнитокалорического эффекта [4]. Модели низкоразмерных магнетиков расширяются и дополняются, в целях приближения к более реальному описанию магнетиков, и рассмотрения новых эффектов. Присутствие беспорядка также существенно влияет на фазовые, критические и магнитные свойства систем.

В работе изучаются фазовые, критические и магнитные свойства одномерной модели изинговских спинов, включающей анизотропию, примеси, а также фрустрацию, вызванную конкуренцией нескольких упорядочений. Гамильтониан системы имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = \Delta \sum_{i=1}^N S_{i,z}^2 + V \sum_{i=1}^N S_{i,z} S_{i+1,z} + J \sum_{i=1}^N \sigma_{i,z} \sigma_{i+1,z} - h \sum_{i=1}^N \sigma_{i,z} - \mu \sum_{i=1}^N S_{i,z},$$

где  $S = 1$  – изинговский псевдоспин, связанный с зарядовыми степенями свободы;  $\sigma = 1/2$  – изинговский спин;  $\Delta$  – одноионная анизотропия;  $V$  – межузельные корреляции в форме обмена Изинга;  $J$  – спиновый обмен в форме Изинга;  $h$  – внешнее магнитное поле;  $\mu$  – химический потенциал, с помощью которого фиксируется плотность суммарного заряда примесей в системе:

$$nN = \sum_{i=1}^N S_{i,z}.$$

Таким образом, система разбавлена отождженными взаимодействующими немагнитными примесями двух типов. Ранее влияние примесей и фрустрации в данной модели было подробно изучено в двумерном случае [5,6].

С помощью метода трансфер-матрицы в одномерном случае получены аналитические выражения для статсуммы и термодинамических величин. Мы изучили свойства основного состояния системы, построили фазовые диаграммы и обнаружили большое разнообразие фрустрированных фаз с различной структурой и остаточной энтропией. Анализ энтропии на границах разделения фаз, а также температурных зависимостей термодинамических величин показал наличие так называемых псевдопереходов. Так, величины, связанные с первыми производными термодинамического потенциала (такие как энтропия и намагниченность) демонстрируют резкий скачок, напоминающий разрывы при фазовых переходах первого рода. Тогда как теплоемкость, магнитная восприимчивость, а также корреляционная длина демонстрируют сильные острые пики, подобные расходимостям при фазовых переходах второго рода. Однако при этом критическое поведение не является сингулярным, хотя допускается анализ псевдокритических индексов. Полученные псевдокритические индексы для псевдопереходов совпадают с ранее установленными результатами для других одномерных моделей [7] и составляют  $\alpha = 3$  для теплоемкости,  $\nu = 1$  для корреляционной длины и  $\gamma = 3$  для магнитной восприимчивости.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект FEUZ-2020-0054, а также научного гранта для молодых ученых Уральского Федерального Университета.

### Литература

1. W.X. Zhang et al. RSC advances 3, 3772 (2013).
2. E. Aydiner et al. Phys. Status Solidi B 243, 2901 (2006).
3. S.M. de Souza and O. Rojas, Solid State Commun. 269, 131 (2017).
4. M.E. Zhitomirsky, Phys. Rev. B 67, 104421 (2003).
5. D.N. Yasinskaya, V.A. Ulitko, Y.D. Panov, IEEE Trans. Magn. 58, 1 (2022).
6. D.N. Yasinskaya, V.A. Ulitko, Y.D. Panov, Phys. Solid State 63, 1588–1592 (2021).
7. Y. Panov, O. Rojas, Phys. Rev. E. 103, 062107 (2021).



*Научное издание*

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

Тезисы  
23 сентября – 2 октября 2022 г.

Главный редактор В. Н. Рыжов д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)  
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