



7 - 14 ноября 2012 г.
г. Екатеринбург

XIII Всероссийская школа - семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ



Институт физики металлов УрО РАН
Институт теплофизики УрО РАН
Институт электрофизики УрО РАН
Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина



Тезисы докладов

XIII Всероссийская школа-семинар
по проблемам физики конденсированного состояния вещества
(СПФКС-13)

7–14 ноября 2012 года

г. Екатеринбург
2012

Финансовая поддержка

Российский Фонд Фундаментальных Исследований
Фонд некоммерческих программ «Династия»
Уральское отделение Российской Академии Наук

Оргкомитет

- * Телегин Андрей Владимирович — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (председатель оргкомитета)
- * Горбачев Игорь Игоревич — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя оргкомитета)
- * Гудин Сергей Анатольевич — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя оргкомитета)
- * Гудина Светлана Викторовна — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (учёный секретарь)

Программный комитет

- * Сташков Алексей Николаевич — к.т.н., ИФМ УрО РАН (председатель)
- * Журавлев Андрей Константинович — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя)
- * Арапова И.Ю. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Блинова Ю.В. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Волосников Д.В. — к.ф.-м.н., ИТФ УрО РАН
- * Горбачев И.И. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Гудин С.А. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Гудина С.В. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Кайгородов А.С. — к.ф.-м.н., ИЭФ УрО РАН
- * Каменский И.Ю. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Кругликов Н.А. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Мостовщикова Е.В. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Неверов В.Н. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Пронин А.А. — к.ф.-м.н., ИОФ им. Прохорова
- * Телегин А.В. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- * Ширинкина И.Г. — к.т.н., ИФМ УрО РАН
- * Шкварин А.С. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН

Локальный комитет

- * Ширинкина Ирина Геннадьевна — к.т.н., ИФМ УрО РАН (председатель)
- * Агзамова П.А. — ИФМ УрО РАН
- * Андбаева В.Н. — ИТФ УрО РАН
- * Вершинин А.В. — ИФМ УрО РАН
- * Волкова З.Н. — ИФМ УрО РАН
- * Гапонцева Н.Н. — ИФМ УрО РАН
- * Гохфельд Н.В. — ИФМ УрО РАН
- * Ефремов А.В. — ИФМ УрО РАН
- * Заяц С.В. — ИЭФ УрО РАН
- * Меренцов А.И. — УрФУ
- * Садыков А.Ф. — ИФМ УрО РАН
- * Саламатов Ю.А. — ИФМ УрО РАН
- * Смольников А.Г. — ИФМ УрО РАН
- * Сташкова Л.А. — ИФМ УрО РАН
- * Столбовский А.В. — ИФМ УрО РАН
- * Хотяенкова М.Н. — ИТФ УрО РАН
- * Шкварина Е.Г. — ИФМ УрО РАН

Содержание

Вступительная статья	1
Институт физики металлов	5
Аналитический отчет о XII Всероссийской молодежной школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества, 2011 год	7
Лекции	11
Технологии получения современных лекарственных препаратов: органический синтез и датчики контроля, <i>Артемьев Г.А., Волосников Д.В.</i>	13
Калибровочная теория стеклования, <i>Васин М.Г.</i>	14
Исследование нелинейной прецессии намагниченности в перпендикулярно намагниченной пластине в условиях ориентационного перехода, <i>Власов В.С., Плешев Д.А., Кирушев М.С., Котов Л.Н., Щеглов В.И., Шавров В.Г.</i>	16
Влияние ударных волн на состав и физико-химические свойства оксидов. Моделирование планетарных процессов, <i>Гижевский Б.А.</i>	17
Прикладная сверхпроводимость: сверхпроводящие материалы для проекта ИТЭР, <i>Дерягина И.Л., Попова Е.Н., Романов Е.П.</i>	18
Энергетика наночастиц и нанопорошков, <i>Ильин А.П.</i>	20
Нейтроннографические установки реактора ИВВ-2М (г. Заречный), <i>Максимов В.И., Пархоменко В.Д.</i>	21
ЯМР в манганитах, <i>Михалев К.Н.</i>	22
Натриевые кобальтаты – между ВТСП и фрустрированными магнетиками, <i>Мухамедшин И.Р.</i>	23
Проверки фундаментальных симметрий на ускорителях: поиск ЭДМ заряженных частиц и лёгких ядер, <i>Николаев Н.Н.</i>	24
Поведение вещества в условиях экстремального действия высоких давлений и температур, <i>Пилюгин В.П.</i>	26
Свойства сверхкритических флюидов (к 150-летию Б.Б. Голицына), <i>Рютин С.Б., Скрипов П.В.</i>	27
Кристаллизация и кавитация переохлажденных расплавов, <i>Чернов А.А.</i>	28
Рентгеновская спектроскопия: принципы и применение, <i>Шкварин А.С.</i>	29
Неравновесная кинетика электронной жидкости: фермионная и бозонная температуры, <i>Щелкачев Н.М.</i>	30
Магнитные явления	31
Дрейф доменных границ во внешнем периодическом магнитном поле, <i>Агафонов Л.Ю., Лысов М.С., Памятных Л.А.</i>	33

Магнетокалорический эффект в порошках сплава $\text{HoCo}_{1.76}\text{Fe}_{0.24}$, <i>Тарасов Е.Н., Осадченко В.Х., Аникин М.С., Зинин А.В.</i>	34
Особенности магнитных свойств ферробората $\text{Sm}_{0.7}\text{Ho}_{0.3}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$, <i>Бегунов А.И., Демидов А.А., Кульченков Е.А.</i>	35
Учёт спиновой поворотной симметрии в рамках метода LDA+DMFT, <i>Белозеров А.С., Леонов И.В., Анисимов В.И.</i>	36
Формирование однонаправленной анизотропии в бислоях $\text{Mn}/\text{Ni}_{77}\text{Fe}_{23}$, <i>Блинов И.В., Матвеев С.А., Попов В.В.</i>	37
Свойства колебательной системы «Магнитная жидкость – воздушная полость», <i>Боев М.Л.</i>	38
Исследование взаимосвязи спонтанной намагниченности с тепловым расширением и теплоёмкостью упорядоченного и разупорядоченного сплавов Fe_3Pt , <i>Болотин К.Е., Подгорных С.М.</i>	39
Компьютерное моделирование магнитного гистерезиса в ансамбле наноразмерных зёрен интерметаллида $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{V}$ при наличии межзёренного обменного и магнитостатического взаимодействий, <i>Болячкин А.С., Волегов А.С.</i>	40
Исследование магнитной фазовой диаграммы соединений $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_x\text{Al}_{0.12-x})_{13}$ методом Эффекта Мёссбауэра, <i>Вершинин А.В., Сериков В.В., Клейнерман Н.М., Мушников Н.В.</i>	41
Методы определения межзёренного обменного взаимодействия в наноструктурированных сплавах системы $\text{Nd} - \text{Fe} - \text{V}$ вблизи состава фазы типа $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{V}$, <i>Волегов А.С., Кудреватых Н.В., Болячкин А.С.</i>	42
Рост кристаллов натриевых кобальтатов Na_xCoO_2 методом бестигельной зонной плавки с оптическим нагревом, <i>Гильмутдинов И.Ф., Салосин М.А., Мухамедшин И.Р.</i>	43
Исследование магнитного смещения в слоистых плёночных структурах типа FeNi/FeMn с гранулированной прослойкой $\text{Co} - \text{Al}_2\text{O}_3$, <i>Горьковенко А.Н., Лепаловский В.Н., Савин П.А., Васьковский В.О.</i>	44
Исследование нелинейной динамики доменных границ в магнетиках с модуляцией магнитных параметров, <i>Гумеров А.М., Кудрявцев Р.В., Муртазин Р.Р., Богомазова О.Б.</i>	45
Исследование возбуждения гиперзвука в трёхслойной магнитной структуре, <i>Дианов М.Ю., Власов В.С., Котов Л.Н., Шавров В.Г., Щеглов В.И.</i>	46
Магнетокалорический эффект в сплавах Гейслера $\text{Ni}_{2.19-x}\text{Fe}_x\text{Mn}_{0.81}\text{Ga}$, <i>Дробосюк М.О., Бучельников В.Д., Файзуллин Р.Р., Таскаев С.В., Соколовский В.В., Павлухина О.О.</i>	47
Исследование дисперсионного состава магнитных жидкостей, <i>Елифанов Ю.А., Елфимова Е.А.</i>	48
Влияние термических обработок на микроструктуру, фазовый состав и гистерезисные характеристики гетерогенных высококоэрцитивных сплавов SmGdZrCoCuFe , <i>Иванов Р.П., Кабанов С.С.</i>	49

Особенности электронного спектра и конкуренция магнитных флуктуаций в γ -железе, <i>Игошев П.А., Ефремов А.В., Катанин А.А., Потеряев А.И., Анисимов В.И.</i>	50
Магнитные свойства твёрдых растворов $Cd_{1-x}Zn_xCr_2S_4$, <i>Кирдянкин Д.И., Ефимов Н.Н., Диденко В.Д., Мельников А.А., Тюлюмджиев Э.А.</i>	51
Получение массивных наноструктурированных сплавов системы РЗМ-(3d-Me)-В из их порошков методом электрошокового компактирования, <i>Комаров Ф.А., Кудреватых Н.В., Андреев С.В., Маркин П.Е., Волегов А.С.</i>	52
Влияние температуры отжига на гистерезисные свойства плёнок $Fe_{20}Ni_{80}/Tb-Co$ и $Fe_{20}Ni_{80}/Ti/Tb-Co$ с однонаправленной магнитной анизотропией, <i>Кулеш Н.А., Васьковский В.О., Балымов К.Г., Свалов А.В.</i>	53
Магниторефрактивный эффект в гетероструктурах манганитов, <i>Лапина Ю.В., Телегин А.В., Степанцов Е.А.</i>	54
Магнитные гистерезисные свойства наноструктурированных сплавов системы (Nd,Pr) – (Fe,Co) – В вблизи фазового состава $Nd_2Fe_{14}B$ при «гелиевых» температурах, <i>Незнахин Д.С., Волегов А.С., Кудреватых Н.В., Андреев С.В.</i>	55
Влияние изгибных деформаций спирального домена на его устойчивость, <i>Мальцев В.Н., Нестеренко А.А., Пампура Е.М.</i>	56
Спиновый переход в соединении $LaCoO_3$, <i>Новоселов Д.Ю., Коротин Д.М., Анисимов В.И.</i>	57
Об устойчивости намагниченности в квазиодномерных поликристаллических системах, <i>Иванов А.А., Орлов В.А., Орлова И.Н.</i>	58
Магнитные состояния и магнитосопротивление интеркалированных соединений Fe_xTiS_2 , <i>Проскурина Е.П., Прошкин А.В., Шерокалова Е.М., Селезнёва Н.В., Баранов Н.В.</i>	59
Намагниченность поликристаллов магнетиков с сильной анизотропией, <i>Прошкин А.И.</i>	60
Теоретический анализ электронных и магнитных свойств низкоразмерной системы NaV_2O_4 , <i>Пчелкина З.В., Соловьёв И.В., Арита Р.</i>	61
Магнитоэлектрический и фотогальванический эффекты и магнитная динамика в антиферромагнетике Gd_2CuO_4 , <i>Радзивончик Д.И., Меньшенин В.В.</i>	62
Магнитные спектры ансамбля ферромагнитных частиц: сравнение метода Незельмана и Дубовика, <i>Власов В.С., Размыслов И.Н., Будина А.А., Турков В.К.</i>	63
Особенности роста кристаллов галлата лантана $LaGa_{1-x}Mn_xO_3$ методом бестигельной зонной плавки с оптическим нагревом, <i>Салосин М.А., Гильмутдинов И.Ф., Мухамедшин И.Р.</i>	64
Магнитная восприимчивость $n-Ge:As$ вблизи фазового перехода изолятор – металл по данным ЭПР и СКВИД магнитометрии, <i>Семенихин П.В., Вейнгер А.И., Тиснек Т.В., Макарова Т.Л., Голощаров С.И.</i>	65

Пространственно-модулированные антиферромагнитные структуры в мультiferроике типа ViFeO_3 во внешнем магнитном поле, <i>Соловьёв С.В., Попков А.Ф., Звездин А.К., Гареева З.В., Кулагин Н.Е.</i>	66
Влияние структурных изменений на тип магнитного упорядочения в LaMn_2Si_2 , <i>Соснин Р.И., Шориков А.О., Потеряев А.И., Анисимов В.И.</i>	67
Анализ процессов намагничивания магнитной жидкости в слабых полях, <i>Танцюра А.О.</i>	68
Моделирование методом Монте-Карло обменного смещения в сплавах Гейслера NiMnGa , <i>Тараненко И.А., Бучельников В.Д., Соколовский В.В., Таскаев С.В.</i>	69
Переход металл–диэлектрик в модели Хаббарда при учёте несоизмеримых магнитных структур, <i>Тимиргазин М.А., Аржников А.К., Ирхин В.Ю.</i>	70
Магнитные свойства наноразмерных плёнок $\text{Mg}(\text{Fe}_{0.8}\text{Ga}_{0.2})_2\text{O}_{4+\delta}$ на подложках кремния, <i>Труханов А.В., Стогний А.И., Новицкий Н.Н., Труханов С.В., Васильев А.Н., Кецко В.А., Гераськин А.А.</i>	71
Дисперсионное соотношение для упругих волн в двухслойной структуре феррит-пьезоэлектрик, <i>Галичян Т.А., Фирсова Т.О.</i>	72
Магнитная структура и магнитная анизотропия нанокристаллических плёнок на основе Fe, <i>Харин Е.В., Шефтель Е.Н.</i>	73
Исследование сверхрешёток $[\text{Co}/\text{Cu}]_n$ методом ЯМР, <i>Чупраков С.А., Блинов И.В., Оглобличев В.В.</i>	74
Влияние аморфизации на магнитное состояние и магнитотепловые характеристики сплава Gd_3Ni , <i>Шишкин Д.А.</i>	75
Влияние кристаллической структуры на электронную и магнитную конфигурации f -оболочки в слоистом соединении $\text{Pu}_2\text{Co}_3\text{Si}_5$, <i>Шориков А.О., Лукоянов А.В., Анисимов В.И., Дремов В.В.</i>	76
Фазовые переходы и критические явления	77
Плёночная конденсация в плоскощелевом конденсаторе контурной тепловой трубы, <i>Бартули Э.Ф.</i>	79
Исследование гетерогенной кавитации леннард-джонсовской жидкости, <i>Бобров К.С.</i>	80
Расчёты растворимости карбонитридов в малоуглеродистых низколегированных сталях с V и Ti, <i>Горбачёв И.И., Пасынков А.Ю.</i>	81
Особенности затвердевания расплавов Cr – C при небольших скоростях охлаждения, <i>Стерхова И.В., Камаева Л.В.</i>	82
Исследование критического поведения модели Хаббарда на квадратной решётке методом точной диагонализации, <i>Кашин И.В., Мазуренко В.В.</i>	83
Электронная структура и магнитные свойства соединений PuMgGa_5 , <i>Лукоянов А.В., Шориков А.О., Анисимов В.И.</i>	84
Вязкость расплавов Al – Co (до 10 ат.% Co), <i>Меньшикова С.Г., Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И., Корепанов А.Ю., Мухгалин В.В.</i>	85

Об особенностях вязкости расплавов Al–Fe (до 10 ат.% Fe), <i>Меньшикова С.Г., Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И., Корепанов А.Ю., Суслов А.А.</i>	86
Влияние исходного состояния на формирование упорядоченной структуры в сплаве Cu – 49ат.%Pd, <i>Новикова О.С., Клюкин И.В., Леушина В.С., Волков А.Ю.</i>	87
Электрические свойства $Cu_{1-x}Ag_xGeAsSe_3$ ($x = 0.55 - 0.65$) при низких температурах и высоких давлениях, <i>Мельникова Н.В., Хейфец О.Л., Пинигина К.С., Филиппов А.Л.</i>	88
Компьютерное моделирование стекольной динамики системы коллапсирующих сфер, <i>Рыльцев Р.Е., Щелкачев Н.М., Рыжов В.Н., Шуняев К.Ю.</i>	89
Учёт зависимости энергий межатомных взаимодействий от концентрации компонент бинарного сплава при анализе его возможных структурных состояний, <i>Халиков А.Р., Дмитриев С.В.</i>	90
Электрические свойства $AgFeAsSe_3$ и $AgFeSbSe_3$ при экстремальных воздействиях, <i>Хейфец О.Л., Нугаева Л.Л., Тебеньков А.В., Волегов А.С., Шакиров Э.Ф., Мельникова Н.В., Филиппов А.Л.</i>	91
Исследование теплоёмкости одномерного изинговского ферромагнетика, <i>Шабунина Е.В., Шабунин М.Е., Удодов В.Н.</i>	93
Электрические свойства аморфных халькогенидов системы Ag – Ge – As – S, <i>Шакиров Э.Ф., Хейфец О.Л., Мельникова Н.В., Бабушкин А.Н.</i>	94
Учёт динамических электронных корреляций в расчётах спектральных характеристик в соединении FeSi, <i>Шориков А.О., Лукоянов А.В., Мазуренко В.В., Анисимов В.И.</i>	95
О замерзании теплоносителя в медь-водяных контурных тепловых трубах, <i>Юшакова С.И.</i>	96
Проводимость и транспортные явления	97
Анизотропия длин свободного пробега фононов в кристаллах кремния при низких температурах. Роль фокусировки фононов, <i>Кулеев И.И., Кулеев И.Г., Бахарев С.М., Инюшкин А.В.</i>	99
Влияние гибридизации примесных состояний на электронную подвижность $Hg_{1-x}Me_xSe$ ($Me = Fe, Co$), <i>Окулов В.И., Лончаков А.Т., Говоркова Т.Е., Дерюшкин В.В., Бобин С.Б.</i>	100
Новые данные о магнитных и резистивных свойствах магнитных полупроводников $La_{0.85}Ba_{0.15}MnO_3$ и $La_{0.85}Sr_{0.15}MnO_3$, имеющих отношение к колоссальному магнитосопротивлению, <i>Куркин М.И., Гудин С.А., Гапонцева Н.Н., Нейфельд Э.А., Королёв А.В., Угрюмова Н.А.</i>	101
Температурная зависимость квантового времени жизни в структурах n – InGaAs/GaAs с двойными сильно-связанными квантовыми ямами, <i>Арапов Ю.Г., Гудина С.В., Неверов В.Н., Подгорных С.М., Якунин М.В.</i>	102
Расчёт зонной структуры суперионных проводников Cu_2Se и Ag_2Se из первых принципов, <i>Давлетшина А.Д.</i>	103

Электрофизические характеристики композиционного материала диоксид олова – серебро, <i>Добросмыслов С.С., Кирко В.И., Нагибин Г.Е., Попов З.И.</i>	104
Исследование индуцированного давлением перехода металл-диэлектрик в перовските FeSiO_3 методом LDA+DMFT, <i>Дьяченко А.А., Шорииков А.О., Лукоянов А.В., Анисимов В.И.</i>	105
Скейлинг в гетероструктурах n – InGaAs/GaAs в режиме квантового эффекта Холла, <i>Клепикова А.С., Неверов В.Н., Гудина С.В., Харус Г.И., Шелушинина Н.Г., Якунин М.В.</i>	106
Спектры модуля адмитанса тонких аморфных композитных плёнок с содержанием магнитной металлической фазы, <i>Ласёк М.П., Власов В.С., Котов Л.Н., Кирпичёва О.А.</i>	107
Температурная зависимость электросопротивления быстрозакалённых сплавов на основе железа, <i>Михалицына Е.А., Катаев В.А.</i>	108
Спектральные свойства сверхпроводника LiFeAs: LDA+DMFT подход, <i>Новоселов Д.Ю., Скорняков С.Л., Лукоянов А.В., Анисимов В.И.</i>	109
Компьютерное моделирование электронной подсистемы и транспорта в релаксированных Si/SiGe гетероструктурах, <i>Орлов Л.К., Ивина Н.Л., Орлов М.Л., Пименов И.В., Мельникова А.А., Ковалевский К.А., Еремичев С.С.</i>	110
Поперечные полевые зависимости коэффициента Холла в электронно-легированных сверхпроводниках $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4+\delta}$, <i>Петухов Д.С., Чарикова Т.Б., Неверов В.Н., Петухова О.Е., Иванов А.А.</i>	111
Температурная зависимость верхнего критического поля в электронном сверхпроводнике $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ с ориентацией (110) и (001), <i>Петухова О.Е., Чарикова Т.Б., Петухов Д.С., Иванов А.А.</i>	112
Энергетическая релаксация в терагерцовых смесителях на основе двумерных полупроводниковых систем, <i>Шангина Е.Л.</i>	113
Электропроводность и диэлектрическая проницаемость разупорядоченной системы магнитных наностровов, <i>Пудонин Ф.А., Шерстнев И.А., Болтаев А.П.</i>	114
Оптика и спектроскопия	115
Спектры поглощения и кругового дихроизма кристаллов $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, легированных ионами кобальта, <i>Алябьева Л.Н., Бурков В.И.</i>	117
Возбуждение поверхностных плазмонов-поляритонов в деформированных одномодовых волоконных световодах, <i>Дышлюк А.В.</i>	118
Переход диэлектрик-металл в LaFeO_3 , <i>Ефремов А.В., Лукоянов А.В., Скорняков С.Л.</i>	119
Эффект магнитопропускания света в композитах на основе легированных манганитов, <i>Железнякова А.А., Телегин С.В., Телегин А.В., Мостовщикова Е.В.</i>	120
Измерение распределения водорода в титановом сплаве ВТ1-0 методом оптической спектроскопии высокочастотного тлеющего разряда, <i>Залогина А.С., Николаева А.Н., Пушилина Н.С., Лидер А.М.</i>	121

Спектральные свойства новых фотохромных (E)-2-стирилхиназолин-4(3H)-онов, <i>Ким Г.А., Овчинникова И.Г., Носова Э.В., Русинов Г.Л.</i>	122
Комбинированные рентгеновские фотоэлектронные и рентгеноспектральные исследования зарядового состояния слоистых дисульфидов хрома-меди, <i>Коротаев Е.В., Перегудова Н.Н., Пичугин А.Ю., Быков Р.В., Сыроквашин М.М., Морозов Н.И., Сотников А.В.</i>	123
Рентгеноспектральное и рентгеноэлектронное изучение тиакаликсаренов, <i>Лаврухина С.А., Федоренко А.Д., Семушкина Г.И., Коротаев Е.В., Крючкова Н.А., Мазалов Л.Н., Торгов В.Г., Костин Г.А.</i>	124
Влияние замещения ионов Mn на оптические свойства CaMnO_3 , <i>Мостовщикова Е.В., Наумов С.В., Солин Н.И., Телегин С.В., Борисова А.Б.</i>	125
Исследование распределения водорода в титановом сплаве после электролитического насыщения, <i>Николаева А.Н., Залогина А.С., Кудияров В.Н., Пушилина Н.С., Лидер А.М.</i>	126
Исследования сильно легированных кремнием AlGaIn слоёв, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии с использованием силана, <i>Осинных И.В., Журавлев К.С., Протасов Д.Ю., Малин Т.В., Давыдов В.Ю., Смирнов А.Н., Кютт Р.Н., Спирина А.В., Соломонов В.И.</i>	127
Согласованный LDA'+DMFT подход для сильно-коррелированных систем, <i>Павлов Н.С., Некрасов И.А., Садовский М.В.</i>	128
Влияние процессов переноса зарядов на рентгеновские K- спектры поглощения меди в $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$, <i>Перегудова Н.Н., Коротаев Е.В., Пичугин А.Ю., Быков Р.В., Сыроквашин М.М., Морозов Н.И., Сотников А.В.</i>	129
Межатомные расстояния для перекрывающихся сфер в твёрдых растворах NiZnO, <i>Пономарев Д.А., Бабанов Ю.А., Саламатов Ю.А.</i>	130
Сателлитная структура в рентгеновских фотоэлектронных и эмиссионных спектрах фталоцианинов меди, <i>Семушкина Г.И., Пляшкевич В.А., Гуляев Р.В.</i>	131
Эмиссионная мёссбауэровская спектроскопия границ зёрен поли- и субмикрористаллического Mo, <i>Сергеев А.В., Попов В.В.</i>	132
Дозиметрические свойства монокристаллов AlN с примесью кислорода, <i>Спирidonov Д.М., Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А.</i>	133
Расчёт электронной структуры кристаллов с потенциалом Бекке-Джонсона, <i>Гордиенко А.Б., Филиппов С.И.</i>	134
Исследование электретных свойств полиэтилена высокого давления, наполненного крахмалом и аэросилом, <i>Фомичева Е.Е., Бурда В.В.</i>	135
Резонансные явления	137
Локализация и подвижность Li в ионном проводнике Li_2ZrO_3 по данным ЯМР ${}^{6,7}\text{Li}$, <i>Арапова И.Ю., Верховский С.В., Геращенко А.П., Михалев К.Н., Садыков А.Ф., Бакланова Я.В., Денисова Т.А., Шейн И.Р.</i>	139

Орбитальное упорядочение в LaMnO_3 по данным ЯМР ^{17}O и ^{139}La , <i>Волкова З.Н., Михалёв К.Н., Верховский С.В., Геращенко А.П.</i>	140
Исследование влияния температуры на степень закрепления спинов в двухслойной плёнке, <i>Зюзин А.М., Сабаев С.Н., Бакулин М.А., Янцен Н.В.</i>	141
Исследование магнитной структуры мультиферроика CuCrO_2 методами ЯМР $^{63,65}\text{Cu}$, <i>Смольников А.Г., Оглобличев В.В., Садыков А.Ф., Пискунов Ю.В., Верховский С.В., Геращенко А.П.</i>	142
Расчёт амплитуды сигналов и спектров электроакустических откликов ансамбля пьезочастиц, <i>Шеболкин М.Л., Котов Л.Н.</i>	143
Физика низких температур	145
Теплоёмкость LaB_6 , <i>Анисимов М.А., Богач А.В., Глушков В.В., Демишев С.В., Самарин Н.А., Гаврилкин С.Ю. Мицен К.В., Шицевалова Н.Ю., Левченко А.В., Филипов В.Б., Gabani S., Flachbart K., Случанко Н.Е.</i>	147
Низкотемпературный холодильный цикл на SF_6 с фазовым переходом «жидкость-твёрдое тело», <i>Паянен Р.И.</i>	148
Резонансное поглощение ультразвука на ян-теллеровских центрах в кристалле $\text{ZnSe}:\text{Cr}^{2+}$ в магнитном поле, <i>Аверкиев Н.С., Гудков В.В., Жевстовских И.В., Барышников К.А., Маякин В.Ю., Сарычев М.Н.</i>	149
Структурные и механические свойства твёрдых тел	151
Микроскопические механизмы водородного охрупчивания на границах зерен в сплавах титана, <i>Бакулин А.В., Кулькова С.Е.</i>	153
Двухфазное состояние соединения MgB_2 , <i>Блинова Ю.В., Кузнецова Е.И., Сударева С.В., Криницина Т.П., Акшенцев Ю.Н.</i>	154
Исследование структуры и свойств поверхности композиционного радиационно-защитного материала, <i>Бондаренко Ю.М., Матюхин П.В.</i>	155
Исследование систем с фрактальным распределением неоднородностей субмикронного масштаба методом спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов, <i>Величко Е.В., Четвериков Ю.О., Аксельрод Л.А., Забенкин В.Н., Краан W.H., Voigtman W.G., Григорьев С.В.</i>	156
Исследование физико-механических свойств кальций-фосфатных покрытий, сформированных из абляционной плазмы, <i>Волокитина Т.Л., Твердохлебов С.И., Хайлов И.П.</i>	157
Некоторые дефекты термической предыстории наплава кварцевого стекла, <i>Волков П.В., Брызгалов А.Н., Ловчиков Д.В., Живулин Д.Е.</i>	158
Изменение ориентировки, структуры и свойств молибдена при холодной и низкотемпературной деформации под давлением, <i>Гапонцева Т.М., Пилюгин В.П., Дегтярев М.В., Воронова Л.М., Чашухина Т.И., Пацелов А.М.</i>	159

Образование нанокристаллической структуры с последующим упорядочением в сплавах на основе Cu – Pd, <i>Гохфельд Н.В., Буйнова Л.Н., Пушин В.Г., Пилюгин В.П., Коуров Н.И.</i>	160
Исследование путей снижения потребляемой мощности сенсоров CO на основе тонких пленок диоксида олова, <i>Максимова Н.К., Сергейченко Н.В., Дробот А.В.</i>	161
Синтез и структура новых халькогенидов переходных металлов типа M_7X_8 , <i>Ибрахим П.Н.Г., Селезнёва Н.В., Баранов Н.В.</i>	162
Исследование структурных особенностей троилита FeS метеоритного происхождения методами рентгеновской дифракции, <i>Камаева Ю.А., Чукин А.В.</i>	163
Модель атомной диффузии в структурно неоднородных границах зерен и ее приложение к нано- и субмикроструктурным материалам, <i>Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Ломаев И.Л.</i>	164
Влияние температуры распада аустенита на морфологию бейнита и свойства трубной стали класса прочности X90 после термомеханической обработки, <i>Клюева С.Ю., Счастливец В.М., Табатчикова Т.И., Яковлева И.Л.</i>	165
ЕАМ потенциалы межатомного взаимодействия для системы Ti – H, <i>Костоусова Т.А., Яковенкова Л.И.</i>	166
Перераспределение легирующих элементов в поверхностном слое аустенитной стали 10X23H18, контактирующей с La – Sr – Mn – O электролитом при 950°C, <i>Красноперова Ю.Г., Покрышкина Д.К., Дегтярев М.В., Чухарев В.Ф., Чашухина Т.И., Воронова Л.М.</i>	167
Кинетика рекристаллизации никеля со структурой различного типа, полученной при сдвиге под давлением, <i>Красноперова Ю.Г., Дегтярев М.В., Чашухина Т.И., Воронова Л.М., Реснина Н.Н.</i>	168
Влияние облучения импульсным электронным пучком и отжига на свойства циркониевого сплава Э110 (Zr – 1%Nb), <i>Кривошеина В.В., Пушилина Н.С., Лидер А.М.</i>	169
Микроструктура и механические свойства литого магния, <i>Кругликов Н.А., Клюкин И.В.</i>	170
Изучение особенностей образования гидрида титана и растрескивания поверхности образцов при электролитическом насыщении водородом и при насыщении из газовой атмосферы, <i>Кудияров В.Н., Пушилина Н.С.</i>	171
Электронно-микроскопическое исследование термической стабильности УМЗ чистого никеля, полученного методом ДКУП, <i>Кузнецов Д.Д., Столбовский А.В., Попов В.В., Шорохов Е.В.</i>	172
Механические свойства композита Ti – Al ₃ Ti при различных условиях нагружения и соотношениях металл/интерметаллид, <i>Лавриков Р.Д., Бородин Е.М., Пацелов А.М., Гладковский С.В.</i>	173
Теоретическое исследование системы Fe – C, <i>Лопатин М.Л., Попов З.И.</i>	174
Механическое легирование сталей азотом методом помолы в шаровой мельнице, <i>Ляшков К.А., Козлов К.А., Шабашов В.А., Литвинов А.В.</i>	175

Релаксационное и резонансное поглощение ультразвука ян-теллеровскими центрами в кристалле GaAs : Cu, <i>Аверкиев Н.С., Гудков В.В., Берсукер И.Б., Барышников К.А., Жевстовских И.В., Маякин В.Ю., Монахов А.М., Сарычев М.Н., Седов В.Е.</i>	176
Кристаллическая структура материалов $\text{Cr}_x\text{Ti}_y\text{Se}_2$, <i>Меренцов А.И., Селезнёва Н.В., Титов А.Н., Воронин В.И., Бергер И.Ф.</i>	177
О динамике макроскопической ротации при равноканальном многоугловом прессовании вязких материалов через штамп с подвижной стенкой, <i>Периг А.В., Голоденко Н.Н.</i>	178
Первопринципные расчеты кристаллической структуры YTiO_3 под давлением, <i>Петров В.П., Шмаков И.Г.</i>	179
Эволюция структуры меди разной степени чистоты, деформированной при 80 К, <i>Покрышкина Д.К., Чашухина Т.И., Воронова Л.М., Дегтярев М.В.</i>	180
Влияние интенсивной пластической деформации на структуру и свойства сплавов на основе алюминия, легированных никелем, <i>Родыгина А.В., Королёв М.Н., Печина Е.А., Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И.</i>	181
Эмиссионная Мессбауэровская спектроскопия границ зерен меди, продеформированной КВД при криогенной температуре, <i>Столбовский А.В., Попов В.В., Попова Е.Н., Пилюгин В.П.</i>	182
Применение дифракционных методов анализа к изучению структурных особенностей поверхностей азотированных аустенитных сталей, <i>Сумин Г.В., Чукин А.В.</i>	183
Влияние низкотемпературной ИПД на механизмы образования Cu – Zn твердых растворов, <i>Толмачев Т.П., Пилюгин В.П., Пацелов А.М., Панфилов П.Е.</i>	184
Исследование кумуляции энергии при взрывном нагружении металлических шаров ударными волнами различной симметрии, <i>Литвинов Б.В., Зельдович В.И., Хейфец А.Э., Фролова Н.Ю., Хомская И.В.</i>	185
Влияние термического отжига на электрические характеристики МДП-структур n – GaAs – Ga_2O_3 , <i>Цулий С.Ю., Яскевич Т.М.</i>	186
Неразрушающий контроль	187
Восстановление топографии поверхностных дефектов при нормальном намагничивающем поле, <i>Агзамова П.А., Гобов Ю.Л., Реутов Ю.Я., Волков А.В.</i>	189
Особенности реализации метода акустической тензометрии при контроле металлоизделий, <i>Муравьев В.В., Балобанов Е.Н.</i>	190
Оптимизация временного разрешения спектрометра для исследования времени жизни позитронов в материалах, <i>Бордулев Ю.С., Лаптев Р.С.</i>	191
Влияние упруго-пластической деформации на фазовые превращения и магнитные свойства аустенитных сталей, <i>Корх М.К., Огнева М.С., Степанова Н.Н., Ригмант М.Б.</i>	192
Решение задачи магнитостатики для некоторых моделей дефектных тел с цилиндрической симметрией, <i>Кудряшова О.В.</i>	193

Импульсное подмагничивание для ЭМАП, <i>Михайлов А.В., Гобов Ю.Л., Смородинский Я.Г.</i>	194
Бесконтактная дефектоскопия нефтегазопроводов на базе протонного оверхаузеровского магнитометра ММРОС, <i>Нархов Е.Д., Сапунов В.А., Денисов А.Ю.</i> ..	195
Влияние ортогонального подмагничивающего поля на процессы смещения разного типа доменных границ при намагничивании пластически деформированной низкоуглеродистой стали, <i>Сашков А.Н., Ничипурук А.П., Огнева М.С.</i>	196
Влияние пластической деформации на магнитные свойства мартенситно-старееющих сталей, <i>Сашков А.Н., Сомова В.М., Сажина Е.Ю., Сашкова Л.А., Огнева М.С., Ногин В.С.</i>	197
Коэрцитиметр с возможностью отстройки от зазора между приставным электромагнитом и контролируемым изделием, <i>Сашков А.Н., Ефремов А.В., Ничипурук А.П., Ногин В.С.</i>	198
Теплофизические свойства веществ	199
Использование оптоволоконного датчика для контроля растворимости газов в жидкостях, <i>Акашев А.А.</i>	201
Уравнение состояния углерода при высоких давлениях, <i>Аливердиев А.А.</i>	202
Магнетокалорический эффект для охлаждения при околокомнатных температурах, <i>Аливердиев А.А.</i>	203
Профили плотности, параметр Толмена и поверхностное натяжение на плоских и искривленных межфазных границах кислорода, азота и их растворов, <i>Андбаева В.Н.</i>	204
Истечение перегретой воды из короткого щелевого канала при различных внешних геометрических условиях, <i>Решетников А.В., Бусов К.А., Мажейко Н.А.</i>	205
Капиллярная постоянная и поверхностное натяжение раствора метан-гелий, <i>Гришина К.А., Якимова Е.Н.</i>	206
Совершенствование методов скоростных исследований перегретой жидкости, <i>Гурашкин А.Л., Ямпольский А.Д.</i>	207
Экспериментальное исследование динамической вязкости субстрата, применяемого в производстве биогаза, <i>Караева Ю.В., Трахунова И.А.</i>	208
Тепловое расширение окиси бериллия в интервале температур 20 – 1550°С, <i>Козловский Ю.М., Яцук О.С., Станкус С.В.</i>	209
Тепловое излучение продуктов сгорания высокоэнергетических установок, <i>Кутергина Н.А., Кузьмин В.А.</i>	210
Предельные растяжения растворов этан–метан, <i>Панков А.С.</i>	211
Теплопроводность и температуропроводность сплавов системы In – Sn, <i>Савченко И.В., Станкус С.В., Агажанов А.Ш.</i>	212
Импульсно-пачечный метод нагрева для исследования теплофизических свойств веществ, <i>Смотрицкий А.А., Ямпольский А.Д., Окуловский Ю.С.</i>	213

Концентрационное поведение вязкости расплавов Сг – С вблизи эвтектического состава, <i>Стерхова И.В., Камаева Л.В.</i>	214
Определение поверхностной свободной энергии на плоской границе кристалл-жидкость: компьютерный эксперимент, <i>Типеев А.О.</i>	215
Компьютерное моделирование плавления перегретого леннард-джонсовского кристалла, <i>Типеев А.О.</i>	216
Аналитические зависимости для капиллярной постоянной и поверхностного натяжения раствора этан–метан в широком интервале температур и концентраций, <i>Хотиенкова М.Н., Андбаева В.Н.</i>	217
Особенности расшифровки дилатограмм, <i>Цветкова К.Ю., Михайлов С.Б., Михайлова Н.А.</i>	218
Электрофизика	219
Температурные исследования импеданса и его компонент аморфных магнитомягких лент на основе кобальта, <i>Семиров А.В., Дервянко М.С., Букреев Д.А., Моисеев А.А., Курляндская Г.В.</i>	221
Особенности метода одноосного магнитно-импульсного компактирования порошков, <i>Заяц С.В.</i>	222
Применение электрофизических методов для консолидации порошковых сред, <i>Кайгородов А.С.</i>	223
Автоэмиссионные свойства искусственных углеродных материалов, <i>Комарский А.А., Чепусов А.С., Кислов Е.А., Кузнецов В.Л.</i>	224
Нелинейные волны на поверхности раздела жидких диэлектриков в сильном горизонтальном электрическом поле, <i>Зубарев Н.М., Кочурин Е.А.</i>	225
Наноматериалы	227
Исследование конечной стадии роста GaAs нитевидных нанокристаллов, <i>Ambrosini S.F., Priante G., Rubini S.</i>	229
Неоднородности в системе Fe/Fe _x TiSe ₂ , <i>Анохин А.А., Шкварина Е.Г., Шарафутдинов М.Р., Упоров С.А., Титов А.Н.</i>	230
Самоорганизующиеся структуры на поверхности кремния при импульсном лазерном воздействии, <i>Ашиккалиева К.Х., Каныгина О.Н.</i>	231
Влияние легирующих добавок на адгезию на границах раздела между переходными металлами и диоксидом циркония, <i>Бакулин А.В., Кулькова С.Е.</i>	232
Магниторезистивные свойства металлических сверхрешеток на основе меди [FM/Cu] _n с различным материалом ферромагнитных слоев, <i>Банникова Н.С., Миляев М.А., Наумова Л.И., Пролядо В.В., Каменский И.Ю.</i>	233
Влияние легирования и режимов диффузионного отжига на структуру сверхпроводящих слоев в композитах на основе Nb ₃ Sn, <i>Валова-Захаревская Е.Г., Попова Е.Н., Дерягина И.Л.</i>	234

Синтез пористого оксида алюминия с заданной морфологией поверхности методом анодирования, <i>Ильин Д.О., Дорошева И.Б., Вохминцев А.С.</i>	235
О роли аморфной фазы в процессах механосинтеза сплавов на основе Fe ₇₅ C ₂₅ , легированных O, N, <i>Елькин И.А., Волков В.А., Чулкина А.А., Елсуков Е.П.</i>	236
ИК-люминесценция пористого кремния с примесями редкоземельных элементов, <i>Карзанова М.В., Демидов Е.С., Чигиринский Ю.И., Европейцев Е.А.</i>	237
Исследование состава и электронной структуры поверхности наноструктурированного сплава нитинол методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, <i>Коротин Д.М., Бартковски С., Курмаев Э.З., Нойманн М., Гундеров Д.В., Валиев Р.З., Чолах С.О.</i>	238
Особенности синтеза углеродных нанотрубок методом каталитического пиролиза этанола, <i>Кравец Н.А., Косых А.С., Чайкин Д.В., Вохминцев А.С.</i>	239
Энергетический спектр и оптические переходы в изомерах фуллерена C ₈₀ , <i>Лобанов Б.В., Мурзашев А.И.</i>	240
Исследование влияния структуры порошков сплава Fe – Si – Nb – Cu – В, полученных методом дезинтеграторного размола на их СВЧ-свойства, <i>Мазеева А.К., Рамалданова А.А., Геращенко Е.Ю., Кузнецов П.А.</i>	241
Фильтрационное горение прессованного нанопорошка алюминия в воздухе, <i>Мостовщиков А.В.</i>	242
Теоретическое исследование системы Li – Si, <i>Попов З.И., Елисеева Н.С.</i>	243
Уменьшение гистерезиса магнитосопротивления спиновых клапанов MnIr/CoFe/Cu/[CoFe/NiFe] при отжиге в магнитном поле, <i>Рябова Т.А., Миляев М.А., Наумова Л.И., Проглядо В.В.</i>	244
Магнитные свойства сверхрешеток Fe/Cr/Gd, <i>Рябухина М.В., Наумова Л.И., Благодатков Д.В., Кравцов Е.А.</i>	245
Зависимость электрических свойств диоксида циркония от стабилизации и исходного фазового состава при высоких давлениях, <i>Семенова Ю.Н., Бабушкин А.Н.</i>	246
Учет многочастичных взаимодействий при изучении термодинамических свойств концентрированных феррожидкостей в магнитном поле, <i>Соловьёва А.Ю., Елфимова Е.А.</i>	247
Исследование взаимодействия между изолированными микро- и нанодоменами при локальном переключении поляризации в монокристаллах ниобата лития, <i>Турыгин А.П., Иевлев А.В.</i>	248
Фазовый переход в магнитных жидкостях: роль межчастичных корреляций, <i>Турышева Е.В., Елфимова Е.А.</i>	249
Компьютерное моделирование процессов формирования наночастиц меди при синтезе из газовой фазы, <i>Чепкасов И.В., Гафнер Ю.Я.</i>	250

Влияние высокодозного облучения на кристаллическую структуру нанопорошков оксида алюминия и циркония, <i>Шабанова К.И., Медведев А.И., Бекетов И.В., Чолах С.О.</i>	251
Энергетический спектр бесконечных углеродных нанотрубок в модели Хаббарда, <i>Шадрин Е.О., Мурзашев А.И.</i>	252
Биофизика	253
Измерение двухфазной релаксационной кривой пальцев <i>in vivo</i> на портативном ЯМР-релаксометре, <i>Земцов А.Д., Сапунов В.А., Нархов Е.Д.</i>	255
Моделирование динамики ионных каналов в кардиомиоците в рамках электронно-конформационной теории, <i>Рывкин А.М., Зорин Н.М., Москвин А.С.</i>	256
ЭПР в биоапатах для калибровки источников ионизирующего излучения, <i>Семеняк Д.Н., Иванов Д.В., Швачко Ю.Н.</i>	257
Авторский указатель	259

ВСТУПИТЕЛЬНАЯ СТАТЬЯ

Часть 1

*«– Аполлон 13... Почему тринадцать?
– Потому что после двенадцати»*

фильм «Аполлон 13»

Здравствуйтесь, уважаемые читатели сборника тезисов и все участники 13-й Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-13)! Я приветствую как новых участников, для которых аббревиатура СПФКС, наконец, обрела конкретный смысл и образ, так и старых знакомых, для многих из которых школа СПФКС уже стала «научным лифтом». Несмотря на то, что цифра «13» даёт о себе знать, и в этом году многоопытным уже организаторам пришлось решать новые головоломки, наш «метафизический» атеизм победил и позволил подготовить открытие школы в условленные сроки!

В этом году академическая наука на Урале и Институт физики металлов УрО РАН отмечают свой 80-летний юбилей. Этому событию посвящена большая вступительная статья в нашем сборнике и цикл лекций об известных уральских учёных в научной программе семинара, начатый нами ещё в прошлом году.

Внимательный и дотошный читатель, интересующийся успехами и развитием школы, конечно, не оставит без внимания подготовленный А. Прониным раздел «Аналитический обзор СПФКС-12 за 2011 год». Если кратко, то отсюда можно узнать, что школа СПФКС крепко стоит на ногах, число и научный уровень участников растут, научные направления самые актуальные и поддерживаются четырьмя ведущими научными организациями Урала и финансовыми фондами России. Также в этом году в конце нашего сборника тезисов впервые приводятся краткие сведения об институтах-организаторах школы. Считаю, что этим мы закрыли ещё один небольшой пробел. Наверняка тот, кому понравилось на СПФКС, захочет больше знать об ее организаторах – людях и учреждениях, где работают такие замечательные учёные, и здесь специализированная, яркая контактная информация, считаю, будет очень кстати! Такая практика будет продолжена. Отмечу, что целевая аудитория СПФКС – это студенты старших курсов, аспиранты, молодые учёные и сотрудники вузов и институтов РАН – то есть те, для кого наука уже практически стала работой, призванием и делом жизни.

Я хотел бы поблагодарить участников прошедшей школы СПФКС-12 за присланные отзывы и комментарии, которые позволили нам провести работу над ошибками и оставить интересные задумки. Так, в этом году мы продолжаем практику проведения параллельных секций с расширенным обсуждением докладов, общеобразовательных лекций по истории, психологии, биологии и т.д., круглых столов по разным темам, увеличили время и количество стендовых секций и т.д. По вашим просьбам мы выделили в научной программе дополнительное время для спортивных мероприятий и отдыха (да, были и такие просьбы!). Особый контроль будет уделён соблюдению режима сна и отдыха в жилых корпусах. Об этом и прочих моментах более подробно будет сказано на открытии школы.

Напоминаю, что оргкомитет СПФКС, как говорится, молод душой и телом (в основном это члены Совета молодых учёных) и открыт для дискуссий и обсуждения идей по улучшению или проведению различных мероприятий на школе. Все во многом определяется вашими желаниями и вашей организованностью, коллеги! На мой взгляд, нет ничего хуже, чем пустое безволие, инертность и стадность. Будьте собой, не тратьте время на пустые разговоры и виртуальные игры, общайтесь друг с другом, заводите полезные знакомства, живите по настоящему, живите сейчас!

До встречи на семинаре!

*Председатель оргкомитета СПФКС-13,
к.ф.-м.н. А.В. Телегин*

ЧАСТЬ 2

«13 (тринадцать) – натуральное число между 12 и 14. Это число часто суеверно называют чёртова дюжина»

Из Интернета

Если в прошлом году школа проходила под знаком «1961», связанным с пятидесятилетием первого полёта человека в космос, то эта школа, по-видимому, пройдёт под знаком «13». Кто-то считает, что тринадцать приносит несчастья, кто-то, правда таких на порядок меньше, наоборот – удачу (в конце этой статьи приведено несколько интересных фактов, связанных с этим числом). Но большинство учёных отличается материалистическим мировоззрением, и, будем считать, что несчастья, связанные с этой цифрой обойдут нас стороной. Тем более занявшись нумерологией можно насчитать все что угодно. Например, школа-семинар была организована в двенадцати годах, но с 2001 года, когда была организована первая СПФКС, прошло одиннадцать лет, сборников тезисов докладов было выпущено двенадцать. Название «школа-семинар» появилось после СПФКС-7, т.е. шесть лет назад, само же сокращение «СПФКС» появилась четыре года назад. Председателей оргкомитета у СПФКС за эти годы было четверо, председателей же всех комитетов (организационного, технического, локального и научного) при исключении самопересечений – десять, если же мы к ним прибавим заместителей председателя оргкомитета, то опять придём к чёртовой дюжине, следующая школа запланирована на 2013 год. Так что цифру 13 предстоит преодолеть ещё много раз!

Одним из критериев оценки школы – является число её участников. До СПФКС-10 с увеличением возраста школы росло и число её участников, что косвенно свидетельствовало о том, что школа развивается. После же юбилейной школы-семинара число участников два года подряд уменьшалось. Это являлось тревожащим фактором, и мы связывали его с общим ухудшением финансирования в науке. В этом году этот нисходящий тренд удалось преодолеть. Число зарегистрированных участников превысило прошлогодние данные на 10%, на 35% возросло число присланных тезисов докладов. По этому показателю лучше только данные по СПФКС-10. Думаю, что с введением в этом году в РФФИ молодёжных грантов, положительная динамика будет продолжена и в 2013 году. В этом году в ряды организаторов влился Институт электрофизики УрО РАН. Из нехороших новостей можно упомянуть ухудшение финансовой поддержки СПФКС-13. Хотя, как и в прошлом году, нам удалось организовать школу в прекрасном и удобном пансионате Селен, но за ту же цену мы смогли предоставить проживание в менее комфортабельных номерах. Зато появились хорошие новости у членов оргкомитета СПФКС-13, – несколько человек защитили за этот год кандидатские диссертации, а у четырёх человек родились дети. Мы поздравляем их! Спасибо молодым родителям за то, что, несмотря на изменение своего семейного статуса, они нашли время и внесли свой вклад в организацию школы! В этом году экспериментально сдвинуто проведение школы, – не как обычно с понедельника по воскресенье, а с середины недели. Посмотрим, на сколько эта идея будет продуктивной. Многие участники жаловались на слишком загруженную научную программу (по 10 часов в день), мы попытались разгрузить её, увеличив на один день время проведения школы.

О традициях. Оргкомитет, по сравнению с прошлым годом, мало изменился и, я надеюсь, что нам, как и в предыдущие годы, удастся создать на школе дружелюбную и творческую атмосферу. Третий год подряд у нас будет проходить «по особому» теоретическая секция. На ней время доклада такое же, как на других секциях, зато время на вопросы почти не ограничено. Так в прошлые годы некоторые доклады растягивались до 1,5 часов. Отношение к этому разное, но по результатам опроса большинство участников поддерживают это начинание. Другая традиция – публикация в сборнике тезисов основных целей СПФКС.

Цели, поставленные перед молодёжной школой-семинаром:

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

Закончить статью я хочу также традиционно: «Уверен, что будут интересные лекции и доклады, будет и их бурное обсуждение. Уверен, что скучать не придётся. Кроме напряжённой научной программы, будет не менее напряжённая общественная жизнь. Запланированы весёлые старты, соревнования по волейболу и футболу, диспуты, различные конкурсы, песни под гитару, традиционный костёр и многое другое».

*Председатель оргкомитета школы-семинара
СПФКС-2–СПФКС-10, к.ф.-м.н. С.А. Гудин*

ИНТЕРЕСНЫЕ ФАКТЫ (ИЗ ИНТЕРНЕТА)

- Одним из общепринятых заблуждений является представление, что Альберт Эйнштейн был верующим человеком. То что это не так, можно понять из его письма «о Боге» адресованное немецкому философу Эрику Гуткинду, написанное Эйнштейном за год до своей смерти 03.01.1954 г.: «Слово «Бог» для меня всего лишь проявление и продукт человеческих слабостей, а Библия – свод почтенных, но все же примитивных легенд, которые, тем не менее, являются довольно ребяческими. Никакая, даже самая изошрённая интерпретация не сможет этого изменить».
- Страх числа 13 называется трискайдекафобия. Это слово произошло от греческого слова «treiskaideka» (тринадцать и страх).
- В Средневековье запрещалось произносить эту цифру, т.к. по преданиям в пятницы 13-го числа собирались ведьмы (собиралось 12 ведьм, а 13-ым на их собрании был дьявол).
- 13 гостей присутствовало за столом во время тайной вечери (12 апостолов и Иисус Христос), после чего Христос был захвачен, а в пятницу он был распят.
- Во многих американских и европейских гостиницах нет тринадцатого этажа и тринадцатого номера. Иногда это также относится к номерам домов и помещений.
- В американских небоскрёбах, часто, после 12-го этажа идёт 14-ый.
- У многих самолётов различных авиакомпаний нет бортового номера 13.
- В оперных театрах Италии отсутствуют места с этим номером.
- На пароходах Италии никогда не бывает 13-ой каюты.
- В Формуле 1 нет ни одного автомобиля с номером 13.
- Число 13 считается благоприятным у индейцев майя.
- Аполлон-13 – пилотируемый космический корабль. Единственный из серии «Аполлон», на котором произошла серьёзная авария во время полёта к Луне.
- В годы Великой Отечественной войны число 13 оказалось счастливым для советского флота. В частности:
 - Подводная лодка С-13 (командир А. И. Маринеско) была самой удачливой на Балтийском флоте. Участвуя в самых рискованных боевых операциях, она, по словам воевавших на ней подводников, «возвращалась буквально с того света». Ею был потоплен лайнер «Вильгельм Густлофф», что стало одним из крупнейших успехов подводного флота СССР.
 - Бот с бортовым номером 13 на Северном флоте в тумане наткнулся на плавучую мину. Мина не взорвалась.
 - Эсминец «Сообразительный» Черноморского флота, имеющий бортовой номер 13, всю войну активно участвовал в боевых действиях, выполнил 218 походов в море, при этом на корабле не погибло в боевых действиях ни одного человека (общие потери – 5 человек за время войны, все погибли при аварии парового котла).
- В составе первой очереди Московского метрополитена было открыто 13 станций.
- В российской военной авиации отсутствуют самолёты с бортовым номером 13, как и позывные лётчиков с этим номером.
- Во многих пассажирских самолётах отсутствует ряд № 13.
- В 1990-е годы в Киеве перестали существовать маршруты автобусов, троллейбусов и трамваев с номером 13. Некоторым маршрутам были присвоены новые номера, другие вообще были отменены.

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ¹

*«Науку двигая вперед,
– мы служим физике металлов...»*

(из гимна ИФМ)

В январе 2012 года **Институту физики металлов**, самому крупному институту Уральского отделения Российской академии наук, исполнилось 80 лет.

Своим рождением он обязан решению XVI съезда ВКП(б) о создании на востоке страны второй угольно-металлургической базы. В развитие этого решения Президиум ВСНХ СССР в мае 1931 года принял постановление «Об организации научно-исследовательской работы на Урале и в Сибири», где, в частности, говорилось: «...*Создать на Урале институт технической физики, выделив для этого силы из Ленинградского физико-технического института...*». Академик А.Ф. Иоффе, возглавлявший Ленинградский физико-технический институт (ЛФТИ), издал приказ о выделении из состава ЛФТИ с января 1932 г., с переходом на самостоятельный бюджет, группы **Уральского физико-технического института (УФТИ)**, определив и направления ее научной деятельности: магнитные и электрические явления, фазовые превращения в сплавах, пластическая деформация металлов, электронография.

Среди 33-х сотрудников ЛФТИ, переведённых в УФТИ, были Я.Г. Дорфман, И.К. Кикоин, Г.В. Курдюмов, А.П. Комар, Б.Г. Лазарев, М.Н. Михеев, М.В. Якутович, Р.И. Янус, ставшие впоследствии всемирно известными учеными. Этим же приказом 8 человек были зачислены студентами-практикантами, в их числе был П.А. Халилеев, позже лауреат Ленинской и Государственной премий. Директором института был назначен научный аспирант, впоследствии член-корреспондент АН СССР М.Н. Михеев, проработавший на этом посту с небольшими перерывами до 1986 года. Летом 1932 года научные кадры института пополнились молодыми специалистами, среди которых были С.П. Шубин, С.В. Вонсовский, Я.С. Шур, А.А. Смирнов, М.М. Носков. С 1986 по 1998 гг. ИФМ возглавлял член-корреспондент РАН В.Е. Щербинин. В 1998 г. директором института избран член-корреспондент, с 2007 года академик РАН В.В. Устинов.

В годы Великой Отечественной войны деятельность института была перепрофилирована. Разрабатывались и внедрялись в производство коэрцитиметры – приборы для контроля массовых и ответственных деталей моторов и танков (М.Н. Михеев). Велись работы: по созданию танковой брони и бронебойных снарядов (В.Д. Садовский, К.А. Малышев и Н.Н. Буйнов), по неразрушающему магнитному контролю артиллерийских снарядов (С.В. Вонсовский и Я.С. Шур) и железнодорожных рельсов (Р.И. Янус), по размагничиванию корпусов кораблей (И.Г. Факидов). Была разработана аппаратура для поиска затонувших кораблей (П.А. Халилеев). Созданы новые образцы мин (И.К. Кикоин, В.С. Аверкиев, В.С. Обухов). После Великой Отечественной войны решение задач мирного времени потребовало пересмотра профиля и структуры многих академических институтов.

В 1958 г. по постановлению Президиума АН СССР институт получил статус самостоятельного с непосредственным подчинением Отделению физико-математических наук АН СССР. В 1967 г. в связи с награждением орденом (указ Президиума Верховного Совета СССР от 1 июня 1967 г.) получил название – **Ордена Трудового Красного Знамени Институт физики металлов АН СССР**. В результате последующих преобразований наш институт имеет теперь (с 01.01.2012 г.) полное название – **Федеральное государственное бюджетное учреждение**

¹Фрагмент статьи В.В. Устинова, В.М. Счастливецова, М.В. Дегтярёва «Институт физики металлов: прошлое, настоящее, будущее» в книге «ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ НА УРАЛЕ. История Института физики металлов в лицах», Екатеринбург: РИО УрО РАН, 496 с. (2012).

науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук.

Направления научной деятельности института, заложенные при его создании, развиваются и трансформируются с развитием физики твёрдого тела. Появились новые направления: физика высоких давлений, радиационная физика твёрдого тела, физика полупроводников, низкотемпературная физика. Неизменным остаётся уникальное сочетание электронной физики, магнетизма и физики прочности и пластичности. Ретроспективный анализ восьмидесятилетней деятельности показал, что **нам есть чем и кем гордиться**. Институт был организован в центре уральской металлургии и машиностроения. Как говорил академик А.Ф. Иоффе, наука о металлах должна развиваться там, где металл рождается, и где его обрабатывают. Это предполагало практическую направленность в деятельности института. Тем не менее, в институте с первых дней существования развивались фундаментальные исследования по физике твёрдого тела. Уже в 1933 г. И.К. Кикоиным и М.М. Носковым был открыт **фотомагнитоэлектрический эффект**, проявляющийся в возникновении электрического поля в освещённом полупроводнике, помещённом в магнитное поле. Для описания электронной структуры и обусловленных ею физических свойств d - и f -металлов, их сплавов и соединений в 1935 – 1936 гг. С.П. Шубиным и С.В. Вонсовским были предложены многоэлектронная полярная модель (её частным случаем является модель Хаббарда) и $s - d(f)$ обменная модель.

В области физического металловедения чёрных и цветных металлов, развивающейся в институте с первых лет его существования, выполнены основополагающие работы по фазовым превращениям в сталях, сплавах и соединениях, по пластической деформации чистых металлов, сплавов и интерметаллидов. Научной школой академика В.Д. Садовского внесён весомый вклад в теорию перекристаллизации сталей, обнаружено и подробно изучено явление структурной наследственности.

По образному выражению одного из учёных, наш институт является не только *«храмом науки, но и кузницей научных кадров»*.

В нашем коллективе выросли 6 действительных членов Российской академии наук – С.В. Вонсовский, В.Д. Садовский, И.М. Цидильковский, В.М. Счастливец, Ю.А. Изюмов, В.В. Устинов и 9 членов-корреспондентов РАН – А.Б. Борисов, Б.Н. Гощицкий, М.Н. Михеев, Н.В. Мушников, Е.П. Романов, В.В. Сагарадзе, Е.А. Туров, Я.С. Шур, В.Е. Щербинин. Членами академии наук СССР и РФ были избраны И.К. Кикоин и М.В. Садовский, перед этим проработавшие в нашем институте более 10 лет. В Украинскую академию наук были избраны В.И. Архаров, А.П. Комар и Б.И. Береснев, а в АН Белоруссии Н.Н. Зацепин. За время существования института через докторантуру, аспирантуру и соискательство подготовлены более 160 докторов и около 750 кандидатов наук.

Полный текст данной статьи представлен на диске «Сборник тезисов 13-й Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-13».

Желающим более подробно ознакомиться со страницами истории института, получить сведения о жизни и научной деятельности ряда ведущих учёных, стоявших у истоков науки о металлах на Среднем Урале и определивших развитие этой науки в течение всех восьми десятилетий существования института, мы рекомендуем обратиться к книге «ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ НА УРАЛЕ. История Института физики металлов в лицах», Екатеринбург: РИО УрО РАН, 496 с. (2012). ISBN 978-5-7691-2320-7.

Оргкомитет СПФКС-13

АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОТЧЕТ О XII ВСЕРОССИЙСКОЙ МОЛОДЕЖНОЙ ШКОЛЕ-СЕМИНАРЕ ПО ПРОБЛЕМАМ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА, 2011 ГОД

1. Общая статистическая информация

XII Всероссийская молодёжная школа – семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-12) проводилась с 14 по 20 ноября 2011 г. в г. Верхняя Пышма Свердловской области. Основными организаторами СПФКС-12 являлись: Уральское отделение РАН, Институт физики металлов УрО РАН (большинство членов оргкомитета – молодые сотрудники ИФМ УрО РАН) и Институт теплофизики УрО РАН при финансовой поддержке УрО РАН, РФФИ и фонда некоммерческих программ «Династия».

СПФКС проводится в формате научной конференции с элементами образовательной направленности. Подавляющее большинство участников СПФКС-12 составляли молодые сотрудники институтов РАН, студенты и аспиранты. С целью повышения квалификации и расширения кругозора молодых специалистов были организованы лекции, посвященные как различным фундаментальным аспектам современной физики твердого тела, так и проблемам технологического и прикладного характера. В качестве лекторов (приглашенных докладчиков) выступили ведущие ученые УрО РАН, а также профессора Уральского федерального университета. Общее количество участников школы-семинара составило 234 человека из 28 городов РФ, представляющих 44 научных и образовательных учреждения, а также 2 человека из Украины, г. Харьков. В том числе 2 академика, 2 члена-корреспондента РАН, 11 докторов наук, 41 кандидат наук и 174 молодых учёных без степени (включая 41 студента и 68 аспирантов). Всего в ходе проведения школы-семинара было представлено (согласно сборнику тезисов и фактической программе конференции) 155 докладов, из них пленарных докладов – 19, устных докладов (кратких сообщений) молодых учёных – 46, стендовых докладов – 55, а также было проведено 3 заседания в формате «круглого стола».

Использование оргкомитетом электронной системы онлайн-регистрации и обработки заявок на участие в конференции позволяет существенно улучшить процессы учета и обработки статистических данных, включающих информацию о количестве и тематике докладов различных категорий, персональном составе докладчиков, географии организаций и т.д. Результаты обработки этой информации можно сопоставлять с данными за предыдущие годы, прослеживая временную динамику различных показателей (см. таблицы 1–3, все цифры приведены согласно фактической программе конференции и сборнику тезисов докладов).

Год	2007	2008	2009	2010	2011
Общее количество	77	176	244	206	155
В том числе лекций	19 (25%)	19 (10.8%)	27 (11.1%)	24 (11.7%)	19 (12%)
Устных докладов	39 (51%)	73 (41.5%)	83 (34.0%)	63 (30.6%)	46 (29.3%)
Стендовых докладов	19 (25%)	49 (27.8%)	119 (48.8%)	95 (46.1%)	55 (35%)
Заочных участников	н/д	35 (19.9%)	15 (6.1%)	24 (11.7%)	35 (22.3%)

Таблица 1. Категории докладов (согласно сборнику тезисов)

Анализируя приведенные выше статистические данные, можно обратить внимание на следующие тенденции. Во-первых, по сравнению с 2009 и 2010 гг. несколько уменьшилось общее

Год	2007	2008	2009	2010	2011
Членов РАН	3 (4%)	3 (1.7%)	3 (1.2%)	3 (1.5%)	4 (2.6%)
Докторов наук	5 (6%)	5 (2.8%)	8 (3.3%)	12 (5.8%)	9 (5.8%)
Кандидатов наук	22 (29%)	35 (19.9%)	41 (16.8%)	31 (15%)	25 (16.1%)
Аспирантов + б/с	34 (44%)	85 (48.3%)	88 (36.1%)	119 (58%)	85 (54.8%)
Студентов	13 (17%)	48 (27.3%)	82 (33.6%)	40 (19.4%)	32 (20.7%)

Таблица 2. Персональный состав докладчиков (согласно сборнику тезисов)

Год	2007	2008	2009	2010	2011
ИФМ УрО РАН	33 (43%)	41 (23.3%)	59 (24.2%)	52 (25.2%)	51 (32.5%)
ИТФ УрО РАН	6 (8%)	12 (6.8%)	15 (6.1%)	14 (6.8%)	11 (7%)
ИЭФ УрО РАН	н/д	н/д	12 (4.9%)	8 (4%)	3 (2%)
УрГУ	21 (27%)	23 (13.1%)	47 (19.3%)	45 (21.8%)	29 (18.5%)
УПИ	4 (5%)	8 (4.5%)	6 (2.5%)	6 (3%)	10 (6.4%)
ЧГУ	н/д	8 (4.5%)	13 (5.3%)	5 (2.4%)	2 (1.3%)
Россия	8 (10%)	70 (39.8%)	78 (32%)	76 (37%)	50 (32%)
СНГ	н/д	4 (2.3%)	3 (1.2%)	3 (1.5%)	2 (1.3%)
Екатеринбург (всего)	69 (90%)	94 (53.4%)	150 (61%)	127 (60.6%)	105 (66.6%)

Таблица 3. География организаций (согласно сборнику тезисов)

количество докладов. Это связано, главным образом, со значительным ухудшением ситуации с финансированием научных организаций в 2011 г. (многие потенциальные участники, в первую очередь, студенты не смогли приехать по финансовым соображениям), а также с физическими ограничениями по суммарному времени сессий и более тщательным отбором докладов научным комитетом школы. Отметим, что в том числе благодаря поддержке фонда «Династия», организаторам школы СПФКС удалось значительно снизить стоимость участия в школе для очных участников. Тем не менее финансовые затруднения сказались на количестве стендовых и устных докладов, которые обычно делаются студентами и аспирантами, в то время как количество заочных участников заметно выросло. В то же время количество лекций (19), по-видимому, является оптимальным для 6-дневного мероприятия (в противном случае приходится существенно ограничивать время, отводимое на устные выступления докладчиков), так как соотношение лекций и докладов в процентном соотношении от общего количества докладов (около 10% лекций и около 30% устных докладов) практически не изменилось. Вторая важная тенденция касается географического распределения докладчиков: за последние четыре года только около 2/3 докладов сделаны жителями Екатеринбурга (в это число входят иногородние студенты и аспиранты, учащиеся в г. Екатеринбурге), в то время как более 1/3 составляют иногородние участники, что отражает статус школы СПФКС как всероссийского научного мероприятия.

Отметим также, что большая часть участников (от 70 до 80% за последние 4 года) является молодыми учеными без степени, аспирантами и студентами, что подтверждает молодежный статус мероприятия. По Екатеринбургу в 2011 г., по сравнению с 2008–2010 гг., увеличилось процентное количество молодых сотрудников из ИФМ УрО РАН (с ~ 25 до 32%), в то время как общее количество людей осталось примерно тем же (около 50 человек). С аспирантами и студентами физических факультетов УрГУ и УПИ (в настоящее время эти организации объединены в Уральский федеральный университет) ситуация обратная: общее количество

участников уменьшилось примерно на 20% (по сравнению с 2009 и 2010 гг.), но относительное количество осталось примерно тем же – около четверти от общего состава докладчиков. Заметное количество докладов (7%) было также представлено молодыми специалистами из Института теплофизики УрО РАН, который является соорганизатором школы СПФКС.

2. Анализ тематики научной программы

Участие значительного количества докладчиков из большого количества различных организаций позволило осветить широкий спектр основных проблем современной физики конденсированного состояния вещества. Отметим, что на семинаре существует традиция приглашать нескольких докладчиков из смежных областей физики, представителей различных высокотехнологичных отраслей промышленности, а также биологии или медицины. Такая политика способствует расширению кругозора молодых специалистов и представляется полезной в плане развития междисциплинарного научного сотрудничества. Распределение тематики докладов по секциям приведено в таблице 4.

Год	2009	2010	2011
Магнитные явления	36 (15.7%)	34 (16.5%)	27 (17.2%)
Фазовые переходы и критические явления	39 (17%)	29 (14.1%)	18 (11.5%)
Проводимость и транспортные явления	19 (8.3%)	13 (6.3%)	10 (6.4%)
Оптика и спектроскопия	17 (7.4%)	13 (6.3%)	11 (7%)
Резонансные явления	6 (2.6%)	10 (4.9%)	6 (3.8%)
Физика низких температур	7 (3.1%)	6 (2.9%)	2 (1.3%)
Структурные и механические свойства твёрдых тел	25 (11%)	35 (17%)	23 (14.6%)
Неразрушающий контроль	11 (4.8%)	5 (2.4%)	7 (4.5%)
Теплофизические свойства веществ	18 (7.9%)	18 (8.7%)	16 (10.2%)
Электрофизика	7 (3.1%)	8 (3.9%)	5 (3.2%)
Наноматериалы	37 (16.2%)	27 (13.1%)	19 (12.1%)
Биофизика	7 (3.1%)	3 (1.5%)	5 (3.2%)

Таблица 4. Тематика докладов

Наибольшая часть докладов в процентном отношении посвящена магнитным явлениям (17.2%), структурным и механическим свойствам твёрдых тел (14.6%), а также наноматериалам (12.1%). В составе конференции проводились отдельные сессии по теплофизике (в основном участники из ИТФ УрО РАН, 10.2%), было представлено заметное количество докладов по фазовым переходам и критическим явлениям (11.5%), оптике и спектроскопии (7%), проводимости и транспортным явлениям (6.4%). Несмотря на более-менее равномерное распределение докладов по различным научным направлениям, материаловедческая тематика традиционно преобладает на СПФКС, поскольку значительное (в процентном соотношении) количество докладчиков работают в ИФМ УрО РАН, что, несомненно, отражается в докладах.

С приглашенными докладами на школе выступили ведущие научные сотрудники УрО РАН: академики В.М. Счастливцев и А.М. Ильин, член-корр. В.Е. Щербинин и Н.В. Мушников, доктора наук Г.С. Корзунин, М.В. Дегтярев, А.П. Танкеев, М.И. Куркин, М.А. Миляев, К.Н. Михалев и др. В качестве лекторов также выступили ученые из других институтов РАН, УрФУ, а также из Челябинска и Москвы. Наибольший интерес вызвали лекции академика А.М. Ильина «Нелинейное уравнение диффузии и кольца Лизеганга», академика В.М. Счастливцева об

академик В.Д. Садовском, а также д.ф.-м.н. М.И. Куркина о Нильсе Боре и, конечно, круглые столы. Всего же в течение недели было заслушано 19 лекций, посвященных актуальным проблемам физики твердого тела.

Оценивая степень взаимного соответствия проблематики докладов, поддержанных РФФИ, и перечня упомянутых выше актуальных проблем физики конденсированного состояния вещества, можно отметить следующее. Грантами РФФИ в 2011 г. было поддержано около 30% от общего количества докладов, представленных на школе-семинаре. В примерно таком же количестве докладов (34%) указаны другие источники финансирования, а суммарное количество имеющих финансовую поддержку работ составило 53%. Интересно, что эти цифры меняются в довольно небольших пределах, начиная с 2008 г., хотя за весь указанный период наблюдается тенденция к увеличению процентного количества докладов, имеющих поддержку грантами.

Решение конференции

На заключительном заседании в выступлениях участников школы-семинара и членов оргкомитета была дана высокая положительная оценка прошедшего мероприятия. Отмечалась актуальность научной программы школы, высокий уровень представленных пленарных докладов, значительное число докладов студентов и молодых ученых в программе заседаний, выполненных на хорошем научном уровне. Была одобрена работа оргкомитета и отмечена четкая организация проведения заседаний и презентаций докладов. Отдельно был отмечен положительный опыт организации междисциплинарных докладов на школе.

По итогам проведения СПФКС-12 участниками школы единогласно было принято решение о проведении следующей, тринадцатой Всероссийской молодежной школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-13.

*Отчёт составлен: А.А. Прониным,
А.В. Телегиным,
С.А. Гудиным,
А.Н. Сташковым*

Лекции УБКЛНН

~ o ~

ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ СОВРЕМЕННЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ: ОРГАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ И ДАТЧИКИ КОНТРОЛЯ

Артемьев Г.А.¹, Волосников Д.В.^{2*}

¹Институт органического синтеза УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: dima_volosnikov@mail.ru

Диазотирование используется в производстве многочисленных соединений, в частности при синтезе лекарственных веществ, красителей, ядохимикатов и витаминов. Одной из химических стадий создания биологически активных гетероциклических соединений является диазотирование соответствующих аминов с последующей циклизацией диазосоединений. Диазосоединения очень неустойчивы и через непродолжительное время разлагаются в водном растворе. При высыхании данные соединения могут разлагаться со взрывом. Поскольку диазосоединения нестабильны, получать их необходимо на том же предприятии, где производят целевой продукт. В некоторых случаях выделение диазосоединения невозможно, и его следует использовать сразу по получении. Реакция диазотирования, как правило, происходит быстро, однако различные отклонения технологических параметров от оптимальных значений приводят к резкому снижению выхода целевого продукта вследствие протекания побочных реакций и нестабильности целевого диазосоединения.

В первой части доклада (докладчик – Артемьев Г.А.) будет представлено описание технологического цикла получения лекарственных препаратов на основе диазосоединений в условиях промышленного производства.

Вторая часть доклада (докладчик – Волосников Д.В.) будет посвящена описанию автоматизированного измерительного комплекса для контроля хода реакции диазотирования на основе датчиков регистрации термических, оптических и кондуктометрических параметров в режиме реального времени. Будет рассмотрен принцип работы измерительного комплекса и результаты его апробации в условиях лабораторного стенда.

Основные преимущества комплекса: информативность, миниатюрность датчиков, возможность организации контроля непосредственно в химическом реакторе, возможность организации удаленного доступа, что важно при работе с взрывоопасными веществами. Общее для всех трех методов – регистрация электрических величин и их визуализация с помощью быстродействующего АЦП и уникального ПО, реализация одновременного контроля трех независимых и взаимодополняющих параметров в режиме реального времени.

Метод термозондирования основан на регистрации отклика от импульсно нагреваемого образца [1, 2]. Время измерения ~ 10 мс. Чувствительность к изменению исходного состава образца, наличию растворенного газа ~ 0.001 %. Размер датчика ~ 3 мм.

Метод оптоволоконной рефлектометрии состоит в прецизионном измерении интенсивности излучения, отраженного от сколотого торца одномодового волоконного световода (френелевское отражение). Оптоволоконно с диаметром ~ 9 мкм может быть размещено в любом удобном месте реакционной камеры и не является источником методически вносимых возмущений [3].

Кондуктометрический метод дополняет метод термозондирования.

Работа выполнена в рамках молодежного инновационного проекта Уральского отделения РАН (11-2-ИП-603).

1. Volosnikov D.V., Skripov P.V., Transactions TSTU, **14**, 1, 61 (2008)
2. Шангин В.В., Волосников Д.В. и др., Приборы, **5**, 6 (2012)
3. Gurashkin A.L., Starostin A.A., Ermakov G.V., Skripov P.V., J. Chem. Phys., **136**, 021102 (2012)

КАЛИБРОВОЧНАЯ ТЕОРИЯ СТЕКЛОВАНИЯ

Васин М.Г.

Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия

E-mail: dr_vasin@mail.ru

Стекло известно человечеству очень давно, начиная со времён древней Египетской цивилизации, но предметом интенсивных исследований оно стало лишь в конце прошлого века. Существуют различные методы получения аморфного твёрдого состояния. Однако обычно стекло формируется охлаждением жидкости со скоростью, не позволяющей ей успеть закристаллизоваться. Этот процесс называют стекольным переходом. Стекольные переходы долгое время оставались неизвестными большинству физиков и почти не упоминались в учебниках по физике конденсированного состояния. Ситуация изменилась в 80-х годах прошлого столетия, когда исследования аморфных полупроводников и спиновых стёкол привели к росту интереса к стёклам вообще и процессам их формирования в частности. Сегодня область применения стёкол широка, начиная от прочных металлических стёкол на основе циркония до халькогенидных стёкол в Blu-ray и HD-DVD дисках. К сожалению, на современном этапе развития физики конденсированного состояния, достижения в этой области в значительной степени строятся на методе проб и ошибок вследствие плохого понимания физики процесса стеклования. В теоретических исследованиях сложных неэргодических конденсированных систем, к которым относятся жидкофазные системы и стёкла, доминирующими стали методы компьютерного моделирования. Однако, до сих пор не существует теории, позволяющей качественно и количественно описывать стекольный переход. Поэтому, для более глубокого понимания физики этого процесса и объяснения наблюдаемых универсальных особенностей поведения стеклюющихся систем, необходимо дальнейшее развитие аналитических методов их теоретического описания.

Центральный вопрос теории стекольного перехода можно сформулировать следующим образом: является ли стекольный переход фазовым переходом, или его природа является исключительно динамической? Стекольный переход, с непрерывным изменением объёма и энтропии и резким изменением их производных, похож на фазовый переход второго рода по классификации Эренфеста. Но этот переход не сопровождается появлением у системы дальнего порядка, расходимостью восприимчивости и зависит от скорости охлаждения системы, что не позволяет отнести его к полноценным фазовым переходам. Кроме того, релаксационные процессы при стекольном переходе описываются формулой Фогеля-Фулчера-Таммана, а не степенным выражением, характерным для динамики в критической точке. Однако, описание стекольного перехода, как динамического эффекта, при котором стекольное состояние не является термодинамической фазой, не может объяснить расходимость нелинейной восприимчивости и неаррениусовское поведение температурной зависимости времени релаксации при температуре стеклования.

В представленном докладе делается обзор основных экспериментально наблюдаемых свойств, характерных для стекольных переходов. Обсуждается вопрос об универсальности этого явления. Затем кратко изложены основные теоретические подходы к описанию стеклования.

Вторая часть доклада посвящена новому теоретическому подходу к описанию стекольного перехода во фрустрированной конденсированной системе, основанному на калибровочной теории стекла [1-4]. В этом подходе [5] фрустрация системы является причиной возникновения вихрей, являющихся источниками калибровочного поля. Исследована неравновесная

динамика трёхмерной модели Гейзенберга со свободными вихрями вблизи точки фазового перехода T_c . Показано, что при $T_g > T_c$, вследствие взаимодействия поля локальной намагниченности с калибровочным полем, происходит критическое замедление флуктуаций поля параметра порядка, приводящее к замораживанию структуры в неупорядоченном состоянии. При этом кинетика релаксации фрустрированной модели Гейзенберга вблизи T_g , удовлетворяет закону Фогеля-Фулчера-Таммана. Линейная восприимчивость остаётся конечной, а нелинейная восприимчивость расходится по степенному закону с показателем γ_2 , величина которого, согласуется с экспериментальными данными. Получен характерный для стекольных переходов аналитический вид зависимости корреляционной функции параметра порядка от температуры, на котором, в результате суперпозиции вклада от свободного поля параметра порядка и кооперативного вклада от взаимодействия поля параметра порядка с калибровочным полем, возникает плато. В заключение продемонстрирована связь калибровочной теории с теорией связанных мод [6], и теорией фрустрационно-ограниченных доменов («frustrated-limited domain theory») [7].

1. I. E. Dzyaloshinskii, G.E. Volovik J. Physique, **39**, 693 (1978)
2. J.A. Hertz Phys.Rev.B., **18**, 4875 (1978)
3. N. Rivier, D.M. Duffy J. Physique, **43**, 295 (1982)
4. N. Rivier, Revista Brasileira de Física, **15**, N 4, 311 (1985)
5. M.G. Vasin, J.Stat.Mech., P05009 (2011)
6. David R. Reichman and Patrick Charbonneau, J.Stat.Mech., P05013 (2005)
7. G. Cityplace Tarjus, country-region S.A. Kivelson, Z. Nussinov, and P. Viot, J.Phys.:Condens.Matter **17**, R1143 (2005)

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ ПРЕЦЕССИИ НАМАГНИЧЕННОСТИ В ПЕРПЕНДИКУЛЯРНО НАМАГНИЧЕННОЙ ПЛАСТИНЕ В УСЛОВИЯХ ОРИЕНТАЦИОННОГО ПЕРЕХОДА

Власов В.С.^{1*}, Плешев Д.А.¹, Кирушев М.С.¹, Котов Л.Н.¹, Щеглов В.И.², Шавров В.Г.²,

¹Сыктывкарский Государственный Университет, г. Сыктывкар, Россия

²Институт радиотехники и электроники РАН, г. Москва, Россия

*E-mail: vlasovv78@mail.ru

В работе исследованы особенности вынужденной нелинейной прецессии вектора намагниченности в нормально намагниченной магнитной пластине в условиях ориентационного перехода. Показано, что в поле, меньшем поля насыщения, переменное поле с круговой поляризацией может вызвать прецессию положения равновесия вектора намагниченности [1].

В первой части работы рассматривается случай изотропной пластины. Установлена зависимость периода прецессии положения равновесия от амплитуды переменного поля и угла отклонения равновесной ориентации намагниченности от направления постоянного поля. Определены области существования прецессии положения равновесия по частоте и амплитуде переменного поля, при варьировании намагниченности насыщения [1]. Установлены основные особенности прецессии положения равновесия при несимметричности постоянного поля, а также при несимметричной ориентации поперечного и продольного переменных полей. Выявлена высокая чувствительность прецессии положения равновесия к изменению несимметричности постоянного поля. Обнаружено существование поля срыва, выше которого прецессия равновесия сменяется простой круговой прецессией большой амплитуды. В случае несимметричной ориентации поперечного и продольного переменных полей, выявлен импульсный характер прецессии положения равновесия. Он проявляется в наличии неравномерных сгущений фазовых траекторий на прецессионном портрете. Показана возможность компенсации аномального характера прецессии путём приложения несимметричного постоянного поля. Отмечена весьма высокая критичность компенсации, составляющая единицы процентов от несимметричных компонент постоянного и переменного полей [2]. При варьировании амплитуды переменного поля выявлены пять различных режимов прецессии: №1 – малоамплитудная круговая прецессия, №2 – прецессия положения равновесия без охвата центра, №3 – незатухающая прецессия положения равновесия с охватом центра, №4 – затухающая прецессия положения равновесия с охватом центра, №5 – развёрнутая круговая прецессия. Показано, что при изменении амплитуды переменного поля переход от режима №4 к режиму №5 является резким и обладает гистерезисом по значению амплитуды переменного поля [3].

Во второй части работы исследованы особенности нелинейной прецессии в анизотропной пластине в условиях ориентационного перехода. Отдельно рассматривались случаи одноосной и кубической анизотропии. Выявлены особенности прецессии положения равновесия и других режимов прецессии, связанные с типом анизотропии пластины.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 12-02-01035).

1. В.С. Власов, Л.Н. Котов, В.Г. Шавров, В.И. Щеглов, РЭ, **56**, 84 (2011)
2. В.С. Власов, Л.Н. Котов, В.Г. Шавров, В.И. Щеглов, РЭ, **56**, 719 (2011)
3. В.С. Власов, Л.Н. Котов, В.Г. Шавров, В.И. Щеглов, РЭ, **56**, 1120 (2011)

ВЛИЯНИЕ УДАРНЫХ ВОЛН НА СОСТАВ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОКСИДОВ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАНЕТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ

Гижевский Б.А.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: gizhevskii@imp.uran.ru

Ударно-волновое нагружение (УВН) с использованием взрывных систем, сохраняющих нагруженные объекты, служит эффективным способом моделирования естественных планетарных явлений – астроблем, возникающих при падении метеоритов на Землю. Важность изучения астроблем связана с тем, что в них находят минералы, неизвестные для других месторождений и неподдающиеся синтезу обычными химическими методами. Применение уникальных сферических взрывных систем, разработанных в ВНИИТФ (Снежинск), к различным горным породам и минералам позволило выявить некоторые закономерности ударного метаморфизма породообразующих минералов. К числу наиболее интересных относятся миграционные фазовые переходы на твердофазной стадии процесса. Тематика доклада находится на пересечении различных отраслей науки: физики конденсированного состояния, планетарных наук, материаловедения. Доклад посвящен выяснению природы и механизмов явлений, происходящих в твердых телах при воздействии на них интенсивных динамических деформаций, в частности ударных волн, на примере оксидов как модельных объектов минералов. При этом использованы различные взаимно дополняющие физические методики. Основное внимание уделялось изучению изменений в оксидах под действием ударных волн на уровне химических связей, нарушениям ионного состава и стехиометрии, связи этих процессов с возникновением микро(нано)структуры в оксидах при УВН, этапам образования и характеристикам новых высокоплотных фаз. Для сравнения и получения более полной картины оксиды подвергались также квазистатическим деформациям сдвига под давлением.

Показано, что при относительно слабых параметрах нагружения в оксидах происходит нарушение стехиометрии, появление катионов с пониженной валентностью, образование наноструктуры, возможны изменения симметрии кристаллической решетки. Скопления дефектов на границах кристаллитов и в местах локализованной деформации могут служить зародышами новой фазы. Образовавшийся на этом этапе продукт является неравновесным и обладает повышенной активностью. В генерации высокой дефектности, образовании наноструктуры существенную роль играют пластические деформации, возникающие в процессе УВН. При повышении параметров нагружения возможно разложение оксидов с выделением кислорода. Наноструктура и микротрещины могут способствовать распространению продуктов разложения на значительные расстояния и образованию новых фаз. Установленные закономерности преобразования вещества при УВН важны как для планетарных наук, так и для других направлений науки и технологии, в частности для материаловедения.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, проекты 11-02-00252, 11-02-00166, и проекта “Российско-Германская лаборатория на BESSY”.

ПРИКЛАДНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ: СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОЕКТА ИТЭР

Дерягина И.Л., Попова Е.Н., Романов Е.П.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: deryagina@mail.ru

Обзорный доклад – от истории развития прикладной сверхпроводимости до достижений последних лет. В докладе рассмотрены вопросы развития технологий получения технических сверхпроводящих материалов, становление которых требовало большой научно-исследовательской работы по изучению структуры сверхпроводящей фазы, влияния на токонесущую способность многоволоконных сверхпроводников режимов термообработки, легирования, геометрии композитов.

Первое практическое применение сверхпроводимости стало возможным благодаря созданию низкотемпературных сверхпроводников на основе сплава NbTi, интерметаллидных фаз V_3Ga и Nb_3Sn , способных обеспечивать высокие значения критической плотности тока. В итоге появились первые в мире сверхпроводящие магнитные системы для установок термоядерного синтеза «Токамак-7» и «Токамак-15», ускорительно-накопительных комплексов, приборов ЯМР. Основным разработчиком технологий изготовления сверхпроводящих проводов в России является ВНИИМ им. ак. Бочвара (г. Москва), с которым на протяжении многих лет сотрудничает лаборатория «Прецизионных сплавов и интерметаллидов» ИФМ УрО РАН, обеспечивая исследование особенностей структуры сверхпроводников и ее взаимосвязи с технологическими параметрами [1, 2].

Одним из наиболее масштабных проектов применения сверхпроводящих материалов является проект ИТЭР (Интернациональный термоядерный экспериментальный реактор) как альтернативы существующим на сегодняшний день ядерным реакторам. Для реализации требований ИТЭР необходимо было решить целый ряд сложнейших технических задач из области материаловедения сверхпроводящих материалов, получения исходных материалов высокой чистоты, разработки оригинальных методов термической и механической обработки многокомпонентной композиционной системы, из которой в конечном итоге формируется сверхпроводящий провод. Большинство из этих задач решалось впервые, и их успешное решение легло в основу многочисленных патентов и авторских свидетельств, полученных разработчиками. На первых этапах проекта ИТЭР Россия в составе 8 стран-участниц проекта предоставила для испытаний, которые проводились на модельной катушке сверхпроводящего магнита в Японии, кабели из сверхпроводящих композитов, изготовленных во ВНИИ им. ак. Бочвара. В итоге ВНИИ им. ак. Бочвара получил заказ на изготовление для проекта ИТЭР многоволоконных сверхпроводящих композитов на основе Nb_3Sn и NbTi [3].

Для выполнения обязательств по проекту ИТЭР Россия к 2002 г изготовила около 100 т Nb_3Sn стрендов и 120 т сверхпроводников на основе NbTi. Для обеспечения промышленного выпуска сверхпроводящих проводов, Росатом принял решение об организации производства на ОАО «Чепецкий механический завод». Технологии создания сверхпроводящих композитов, разработанные во ВНИИ им. ак. Бочвара, были адаптированы к условиям реального промышленного производства. К 2009 г. было создано первое отечественное промышленное производство сверхпроводящих материалов, характеристики которых полностью удовлетворяют требованиям технических спецификаций Соглашений о поставках проекта ИТЭР. В этом достижении есть и вклад нашей лаборатории, т.к. ряд научно-технических рекомендаций, предложенных нашими сотрудниками по результатам исследования связи нано-

кристаллической структуры сверхпроводящих слоев Nb_3Sn с критическими характеристиками сверхпроводника и отдельными параметрами технологии позволил оптимизировать технологический процесс и получить сверхпроводящий многоволоконный композит с рекордными значениями критической плотности тока – около 997 A/mm^2 [4-6].

1. Попова Е.Н., Романов Е.П., Сударева С.В. и др., ФММ, **96**, 2, 31-44 (2003)
2. Дерягина И.Л., Попова Е.Н., Романов Е.П. и др., ФММ, **113**, 4, 413-427 (2012)
3. Pansyryny V., Shikov A., Vorobieva A., Cryogenics, **48**, 354–370 (2008)
4. Попова Е.Н., Сударева С.В., Романов Е.П., Дерягина И.Л. и др. Материаловедение, № 10, 52-57 (2009)
5. Дерягина И.Л., Попова Е.Н., Захаревская Е.Г. и др., Журнал Сибирского Федерального Университета. Физика и математика, **4(2)**, 149–161 (2011)
6. Попова Е.Н., Дерягина И.Л., Захаревская Е.Г., Романов Е.П. и др., Материаловедение, № 10, (2012) – в печати.

ЭНЕРГЕТИКА НАНОЧАСТИЦ И НАНОПОРОШКОВ

Ильин А.П.

Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

E-mail: genchem@mail.ru

Любое диспергирование вещества требует затрат энергии, часть которой аккумулируется в виде энергии поверхности (E_s). Влияние поверхности на структуру вещества в объеме частиц заметно лишь для кластеров (E_v). В то же время энергия E_s с уменьшением диаметра кластеров возрастает экспоненциально. Для нанопорошков внутренняя структура частиц становится аналогичной структуре грубодисперсных порошков. Таким образом, наночастицы диаметром от 10 – 30 до 100 нм имеют структурное состояние, отличное и от кластеров и от грубодисперсных частиц. Проведенные исследования нанопорошков металлов показали, что такие порошки имеют ряд особенностей: оксидные защитные пленки толщиной 2 – 10 нм, и их толщина уменьшается для наночастиц диаметром 100 – 30 нм. Особенностью защитных пленок является ее структура в виде двойного электрического слоя [1], который аккумулирует значительную запасенную энергию [2, 3]. При нагревании нанопорошков (НП) металлов они в вакууме спекаются в волне самоспекания за счет эмиссии энергии ($E_s + E_v$) [4, 5].

Измерение абсолютных значений запасенной энергии является сложной технической задачей: при использовании бомбовой калориметрии доля запасенной энергии составляет 10–12 % от теплового эффекта сгорания, например алюминия. При этом возможно неполное сгорание нанопорошка, сгорание платинового тигля или держателя, взаимодействие нанопорошка с поверхностью бомбы, образование мегастабильных фаз продуктов сжигания и др. Разработанный в работе способ дает возможность повысить величину запасенной энергии в нанопорошках путем их облучения потоком ускоренных электронов. Облучение тонких слоев нанопорошков без доступа воздуха электронами с энергией 4 МэВ в течение определенного времени позволило повысить запасенную энергию для НП: алюминия в 1.86, железа – в 2.45, меди – в 2.27 раза. Полученные результаты являются косвенным подтверждением модели металлической наночастицы, основанной на представлениях о структуре двойного электрического слоя толщиной 2 – 10 нм. При пассивировании наночастиц термодинамически разрешенный процесс окисления тормозится электрическим потенциалом, формирующимся при образовании оксидной пленки. Основным окислителем в условиях пассивирования является протон, который образуется на поверхности наночастицы при диссоциации сорбированной воды. Протон диффундирует к поверхности металла, окисляет его и накапливается в наночастицах в виде водорода или гидрида. Содержание водорода в нанопорошках достигает 1.5 мас. %.

1. Ильин А.П., Трушина Л.Ф., Родкевич Н.Г., Физика и химия обработки материалов, **3**, 122 (1995)
2. Ильин А.П., Физика и химия обработки материалов, **3**, 94 (1994)
3. Ильин А.П., Физика и химия обработки материалов, **4**, 93 (1997)
4. Ильин А.П., Громов А.А., Горение алюминия и бора в сверхтонком состоянии, Томск: Изд-во Том. ун-та (2002)
5. Ильин А.П., Роот Л.О., Мостовщиков А.В., ЖТФ, **8**, 140 (2012)

НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКИЕ УСТАНОВКИ РЕАКТОРА ИВВ-2М (г. ЗАРЕЧНЫЙ)

Максимов В.И.* , Пархоменко В.Д.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: kokailo@rambler.ru

В предлагаемой лекции обсуждаются современное состояние и возможности парка нейтронографических установок, размещённых на горизонтальных экспериментальных каналах (ГЭК) исследовательского реактора ИВВ-2М (схема, рис. 1) [1]. Подчёркиваются преимущества и недостатки используемых методик на монохроматизированных нейтронах стационарного источника в сравнении с времяпролётными импульсного реактора (ОИЯИ, ИБР-2, Дубна). Рассматриваются следующие вопросы.

1. Порошковые дифрактометры ГЭК-2, ГЭК-3, ГЭК-7А: используемые образцы, характеристики нейтронографической методики, обработка результатов и виды проводимых исследований.
2. Установка малоуглового рассеяния нейтронов ГЭК-6: пользовательские характеристики и решаемые задачи.
3. Дифрактометр, приспособленный для исследования монокристаллов, ГЭК-7Б: сканирование траекторий в обратном пространстве и уникальность получаемой научной информации.
4. Основные и дополнительные возможности нейтронного материаловедческого центра на ИВВ-2М (кратко): облучение образцов, рентгеновская дифракция, измерения магнитных свойств и электросопротивления.
5. Вместо заключения: краткая информация о нейтронографических установках ИВВ-2М, направлениях исследований, проводимых в Отделе работ на атомном реакторе ИФМ УрО РАН, и список контактов.

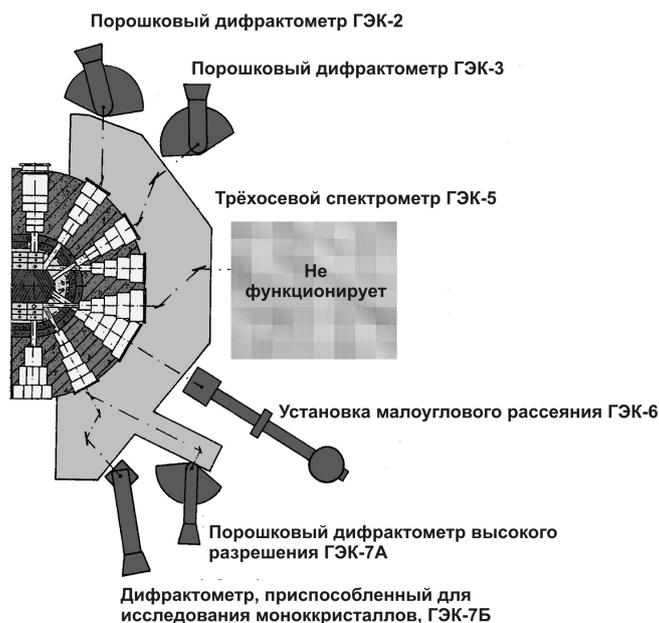


Рис. 1. Схема размещения нейтронографических установок на ИВВ-2М.

ЯМР в МАНГАНИТАХ

Михалев К.Н.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: mikhalev@imp.uran.ru

Манганиты интенсивно исследуются прежде всего как материалы, демонстрирующие эффект колоссального магнитосопротивления (КМС), следовательно, представляющие существенный интерес с практической точки зрения. С другой стороны, это яркие представители сильнокоррелированных оксидных систем с аномально сильной взаимосвязью между решёточными, зарядовыми и спиновыми степенями свободы.

Накопленный за последние годы значительный материал в области исследования этих соединений свидетельствует о необходимости применения локальных экспериментальных методик, позволяющих анализировать на микроскопическом уровне, с одной стороны — спиновое и зарядовое распределение в ближайшем окружении различных ионов, формирующих кристаллическую решётку этих соединений, с другой — низкочастотную спиновую динамику, анализируемую избирательно на каждом атоме, входящем в состав соединения. Одна из экспериментальных методик, которая позволяет получать такую информацию — это ядерный магнитный резонанс (ЯМР).

В докладе даётся обзор ряда работ по ЯМР и магнитной восприимчивости в манганитах, включая оригинальные результаты, полученные в ИФМ УрО РАН. В докладе будут затронуты следующие темы.

1. Структура и физические свойства манганитов.
2. Особенности ЯМР как метода исследования соединений с дальним магнитным порядком.
3. Орбитальный порядок в LaMnO_3 по данным ЯМР ^{139}La , ^{17}O .
4. Изучение микроскопического фазового расслоения методом ЯМР.
5. Магнитные поляроны в слабодопированных манганитах.

Исследования выполнены при поддержке проекта РФФИ 12-02-00358-а.

НАТРИЕВЫЕ КОБАЛЬТАТЫ – МЕЖДУ ВТСП И ФРУСТРИРОВАННЫМИ МАГНЕТИКАМИ

Мухамедшин И.Р.

Институт физики, Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

E-mail: Irek.Mukhamedshin@ksu.ru

Натриевые кобальтаты Na_xCoO_2 представляют собой сложный оксид кобальта, основу кристаллической структуры которых составляют слои CoO_2 , разделённые плоскостями, содержащими атомы натрия. Подобно ВТСП купратам, уровень допирования слоёв CoO_2 дырками может быть изменён в широком диапазоне путём изменения содержания натрия от $x = 0$ до 1. При этом в зависимости от содержания натрия формальное зарядовое состояние атомов кобальта меняется от Co^{3+} ($S=0$) до Co^{4+} ($S=1/2$). Однако в кобальтатах атомы кобальта образуют треугольную подрешётку, в то время как для купратов характерна квадратная подрешётка атомов меди. Треугольная подрешётка магнитных ионов переходных металлов – типичный элемент фрустрированных магнитных систем. Это приводит к тому, что фазовая диаграмма натриевых кобальтатов значительно сложнее, чем купратов, поскольку включает, кроме сверхпроводящей области, различные упорядоченные состояния. Сверхпроводимость, высокая подвижность ионов натрия, большой коэффициент термо-ЭДС при низком удельном сопротивлении, неоднозначность зарядового состояния кобальта в треугольной кристаллической решётке, возможность существования магнитной фрустрации – все эти факты делают исследования кобальтатов весьма актуальными в современной физике конденсированного состояния.

В данной лекции я планирую рассказать о физических свойствах натриевых кобальтатов, а также о наших исследованиях методами магнитного резонанса соединения Na_xCoO_2 с различным содержанием натрия.

План лекции:

1. Введение: исследования слоистых кобальтатов – POI, или краткий исторический экскурс;
2. Кристаллическая структура натриевых кобальтатов;
3. Фазовая диаграмма натриевых кобальтатов по данным макроскопических измерений;
4. Магнитный резонанс: ЯМР, ЯКР, ZFNMR;
5. Фазовая диаграмма натриевых кобальтатов по данным магнитного резонанса;
6. Заключение.

Данные исследования выполнены при частичной поддержке гранта РФФИ № 10-02-01005-а.

ПРОВЕРКИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ СИММЕТРИЙ НА УСКОРИТЕЛЯХ: ПОИСК ЭДМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ И ЛЁГКИХ ЯДЕР

Николаев Н.Н.

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

E-mail: nikolaev@itp.ac.ru

Частицы и ядра со спином могут иметь конечные постоянные Электрические Дипольные Моменты (ЭДМ), если нарушены сохранение пространственной чётности (Р-инвариантность) и симметрия относительно обращения времени. В силу фундаментальной СРТ-теоремы временная (Т)-неинвариантность эквивалентна СР-неинвариантности (комбинированной инверсии). Несохранение Р-чётности, фундаментальное свойство слабых взаимодействий, было установлено в 1956 г., СР-нарушение в распадах нейтральных К-мезонов известно с 1964 г. В т.н. Стандартной Модели (СМ) ожидаемый ЭДМ нуклонов на 17-18 порядков меньше, чем их Магнитный Дипольный Момент (МДМ), разрешённый всеми симметриями. В то же время, во всех обобщениях СМ, включая модные суперсимметричные модели, возможны ЭДМ всего на 10 порядков подавленные против МДМ. Тем самым поиски постоянных ЭДМ частиц и ядер по чувствительности к новой физике вне Стандартной Модели сопоставимы и даже превосходят прямые эксперименты на Большом Адронном Коллайдере. Экспериментальное наблюдение ЭДМ могло бы пролить свет и на загадку барионной асимметрии Вселенной, которая не имеет решения в Стандартной Модели. Сигнал ЭДМ — это прецессия спина в электрическом поле, но в отличие от нейтронов и нейтральных атомов приложенное электрическое поле выносит заряженные протоны, дейтроны, гелионы из установки, так что прямой поиск ЭДМ протонов и дейтронов возможен только на накопительных кольцах.

После краткого обзора экспериментов по поиску ЭДМ ультрахолодных нейтронов и перспектив повышения их чувствительности (ПИЯФ совместно с Институтом Лауэ-Ланжевена на модернизированном реакторе ВВР-М в Гатчине, новые делительные источники нейтронов в Институте П. Шеррера в Швейцарии и в Ок-Риджской национальной лаборатории в США), будут обсуждены планируемые эксперименты EDM-BNL в Брукхэйвенской национальной лаборатории в США и эксперимент JEDI (Juelich Electron Dipole moment Investigations) в Юлихе, Германия. В идеале с техникой замороженного спина в чисто электростатическом накопителе протонов при т.н. магической энергии возможна чувствительность, позволяющая проверить и даже закрыть широко обсуждаемые суперсимметричные теории, перекрыв как минимум на порядок-два чувствительность нейтронных экспериментов. Ускоритель COSY (Cooler Synchrotron) в Юлихе, чисто магнитный накопитель, единственная машина в мире, на которой можно исследовать систематические эффекты на пути к специализированному электростатическому или электро+магнитному накопителю ценой в десятки миллионов УЕ. Одновременно родилась идея первого прямого измерения ЭДМ протона и дейтрона на COSY, дополненном радиочастотным электрическим флиппером, при вложениях в несколько миллионов УЕ. Будет рассмотрена динамика спина в таком кольце, включая почти парадоксальную одинаковость сигнала ЭДМ для флипперов, работающих в моде прозрачности для магнитного и электрического дипольного момента частиц, соответственно. Будет обсуждена прецессия спина в электростатическом кольце за счёт силы тяжести, действующей на заряженные частицы.

Обычно добавление новых резонансных радиочастотных элементов в ускорители приводит к новым нестабильностям и потере поляризации накопленных частиц, и флиппер не исключение: он резко подавляет время когерентности спина. Будет показано, что однако существуют специальные энергии, при которых работа флиппера на выделенных гармониках напротив резко подавляет главный механизм декогерентности спина

Автор рассчитывает, что знакомые с основами ЯМР получат удовольствие от того, как привычные им методы и техника работают для частиц, движущихся по замкнутым траекториям в электрических и магнитных полях в ускорителе.

ПОВЕДЕНИЕ ВЕЩЕСТВА В УСЛОВИЯХ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО ДЕЙСТВИЯ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И ТЕМПЕРАТУР

Пилюгин В.П.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: pilyugin@imp.uran.ru

Выполнен обзор литературных данных по отдельному и совместному действию экстремальных по величине физических параметров: давлений, температуры, сверхсильных магнитных полей и гравитации. Подробно уделено внимание действию высокого давления (от килобарного до мега- и терабарного диапазонов), температуры (от криогенных до свыше $3 \cdot 10^3$ К) на структурно-фазовое состояние и физико-механические свойства ряда химических элементов, сплавов и соединений. Выполнено сравнение энергетических диапазонов воздействия, получаемых различными лабораторными методами при термо-, баро- и деформационных обработках: гидроэкструзии, динамического равноканального прессования, статического и адиабатического сжатия, облучения высокоэнергетическими частицами, лазерного и высокоточковых нагревов, сильноточковых Z-пинчей, электровзрывных генераторов мощных ударных волн [1]. Проведено сопоставление энергонасыщенности методов обработки с величинами энергии связи элементов и соединений. Систематизированы методы деформационных обработок вещества в условиях высокого давления и перспективы получения материалов нового поколения [2]. Уделено внимание некоторым аспектам химии высоких энергий в плане синтеза новых материалов и их перспективного применения. Рассмотрено состояние вещества в условиях сильного сжатия космических объектов: Земли, планет-гигантов, экзопланет, звёзд и в сверхэкстремальных состояниях – кварках, чёрных дырах, магнитарах, кротовых норах [1].

По последним публикациям рассмотрена роль давления в методах производства энергии ядерными и термоядерными методами, а также развитие высокоэнергетических ускорителей и накопителей и некоторых программ исследования процессов высоких плотностей энергии [3, 4]. Описаны методы получения, развития и измерения статических и динамических давлений. Рассмотрено влияние высокого давления на пластичность металлов, поведение дефектов кристаллического строения, фазовые переходы некоторых элементов и соединений: углерода, железа, титана, воды, полифосфонитрида и т.д., на электронные оболочки атомов элементов. Анализируются уравнения состояния вещества и проводится сопоставление теоретических и экспериментальных данных по сильному сжатию веществ [4], рассмотрены квантовые эффекты физики высоких давлений [5, 6].

1. Фортов В.Е., Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе, УФН, **179**, 653 (2009)
2. Глезер А.М., Принципы создания многофункциональных конструкционных материалов нового поколения, УФН, **182**, 559 (2012)
3. Frontiers of High Energy Density Physics: The X-Games of Contemporary Science, Washington, DC; National Acad. Press (2003)
4. Даниленко В.В., Взрыв: физика, техника, технология. М.: Энергоатомиздат (2010)
5. Стишов С.М., Квантовые эффекты в конденсированных средах при высоких давлениях, УФН, **171**, 229 (2001)
6. Гинзбург В.Л., О сверхпроводимости и сверхтекучести (что мне удалось сделать, а что не удалось), а также о «физическом минимуме» на начало XXI века, (Нобелевская лекция, Стокгольм, 8 декабря 2003 г.) УФН, **174**, 1240 (2003)

СВОЙСТВА СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ФЛЮИДОВ (к 150-летию Б.Б. Голицына)

Рютин С.Б., Скрипов П.В.*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: pavel-skripov@bk.ru

План лекции.

1. Сверхкритические флюиды: необычность свойств и возможности применения.
2. Опыты князя Б.Б. Голицына, титана российской науки, по изучению свойств вещества в окрестности критической точки жидкость – пар.
3. Особенности тепловых свойств сверхкритических флюидов в режиме импульсного нагрева.

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И КАВИТАЦИЯ ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ РАСПЛАВОВ

Чернов А.А.

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск, Россия

E-mail: chernov@itp.nsc.ru

При моделировании фазовых переходов в первую очередь встает вопрос о механизме их протекания. Теоретический анализ показывает, что в значительной части случаев в данном процессе выделяются две ярко выраженные стадии. Первая из них – стадия нуклеации, на которой образуется основное число устойчиво растущих зародышей новой (стабильной) фазы. Нелинейная природа нуклеации, выражающаяся в очень сильной зависимости скорости зародышеобразования от степени метастабильности материнской фазы, определяет скоротечность этой стадии в масштабах характерного времени создания метастабильности. И если начало стадии нуклеации обуславливается действием факторов, создающих метастабильность, то ее окончание связано со снижением степени метастабильности, что связано с переходом части вещества метастабильной фазы в зародыши стабильной фазы, который сопровождается выделением (поглощением) скрытой теплоты фазового перехода вопреки продолжающемуся действию указанных факторов, если они, конечно же, продолжают действовать во время фазового перехода. Надо отметить, что по истечении стадии нуклеации доля новой фазы еще относительно мала. Это объясняется тем, что образования даже небольшой доли новой фазы достаточно для того, чтобы частота нуклеации уменьшилась на порядки, по сравнению с начальной. Основная часть материнской фазы переходит в стабильное состояние за счет дальнейшего роста образовавшихся на стадии нуклеации центров при практически неизменном их количестве. Наибольший интерес и наибольшую сложность при изучении фазовых переходов представляет, конечно же, стадия нуклеации. Здесь тесно переплетаются вопросы термодинамики малых систем, кинетики процесса нуклеации зародышей новой фазы и механизма их роста в широком диапазоне размеров, корректного учета эффекта коллективного влияния ансамбля растущих зародышей новой фазы на состояние исходной метастабильной фазы и т. д. Все это в совокупности с действием факторов, создающих метастабильность, воплощается в виде сложной, сильно нелинейной математической проблемы, описываемой системой интегро-дифференциальных уравнений, полного решения которой на данный момент времени нет.

В настоящей работе представлена неравновесная теория объемной кристаллизации расплава, быстро приведенного в переохлажденное состояние, заключающаяся в корректном учете тепловыделения, обусловленного фазовым переходом, путем подстановки в кинетические уравнения, описывающие процесс суммарного превращения, реального распределения поля температур, формирующегося в объеме расплава вокруг растущих центров новой фазы. Определены границы применимости моделей, основанных на учете тепловыделения из балансовых соотношений. Предложенная теория позволяет точно описать кинетику зарождения и роста кристаллов в метастабильной жидкости, а также определить микроструктуру затвердевшего материала. Сформулирован критерий аморфизации для веществ, полученных методом сверхбыстрой закалки из жидкого состояния. Исследованы механизмы кавитации расплава в процессе его кристаллизации, ведущей к формированию в затвердевшем материале микропор и трещин. Их можно условно разделить на два типа: сегрегационные и обусловленные усадкой. Первый заключается в вытеснении движущимися фронтами кристаллизации растворенного в расплаве газа. Второй – с появлением в еще не закристаллизовавшемся расплаве больших растягивающих напряжений. И в том, и в другом случае детально исследована эволюция кавитирующего расплава во времени. Показана существенная зависимость конечного размера кристаллических зерен и кавитационных включений в затвердевшем материале от скорости охлаждения расплава.

РЕНТГЕНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ: ПРИНЦИПЫ И ПРИМЕНЕНИЕ

Шкварин А.С.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: shkvarin@ifmlrs.uran.ru

Рентгеновская спектроскопия позволяет получить целый ряд данных об исследованном веществе. С ее помощью можно изучить химический состав, позиции атомов, зарядовое состояние атомов, электронную структуру и многое другое. Возможность экспериментально исследовать электронную структуру вещества позволяет более точно развивать методы расчёта электронной структуры.

В докладе планируется рассказать о ряде наиболее распространённых методик рентгеновской спектроскопии, их возможностях и ограничениях, а также об их связи с теоретическими методиками.

План доклада:

1. Историческая справка.
2. Техника эксперимента.
3. Оже спектроскопия (AES).
4. Абсорбционная спектроскопия (XAS).
5. Эмиссионная спектроскопия (XES).
6. Фотоэлектронная спектроскопия (XPS). Остовные уровни.
7. Фотоэлектронная спектроскопия (XPS). Валентная полоса.

НЕРАВНОВЕСНАЯ КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОННОЙ ЖИДКОСТИ: ФЕРМИОННАЯ И БОЗОННАЯ ТЕМПЕРАТУРЫ

Щелкачев Н.М.

Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Россия

ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия

E-mail: nms@itp.ac.ru

В (квази)двумерной электронной жидкости в пределе низких температур электрон-электронное взаимодействие приводит к сингулярным по температуре поправкам к проводимости. В простейшем случае такая поправка имеет вид: $\delta G = \ln(T\tau) e^2/2\pi^2$, где τ – время свободного пробега электрона, T – температура. Можно вывести двумерную электронную жидкость из состояния равновесия, например, пропуская перпендикулярно к её плоскости электрический и тепловой токи. Если найти продольную проводимость такой неравновесной электронной жидкости, то получится ответ внешне очень похожий на равновесный, $\delta G = \ln(\tau T_{eh}) e^2/2\pi^2$, только вместо температуры в ответ войдёт эффективная температура T_{eh} , нетривиально зависящая от функций распределения электронов. Если явным образом выписать выражение для T_{eh} , то можно увидеть, что физический смысл T_{eh} – температура электрон-дырочных (бозонных) возбуждений. Аналогично можно увидеть, что в найквистов шум и в другие сингулярные поправки к проводимости вместо температуры войдёт T_{eh} и эффективная температура флуктуационных купперовских пар T_{CP} в области сверхпроводящих флуктуаций. Более того, оказывается, что флуктуационные купперовские пары нагреваются сильнее электрон-дырочных пар, если электронная жидкость выводится из равновесия сильным электрическим током. Если тепловой ток – источник неравновесности, то $T_{eh} > T_{CP}$. Объяснить такой эффект можно тем, что купперовские пары – заряженные бозоны, а электрон-дырочные пары – нейтральные бозоны... Почему оказалось так, что вдали от равновесия понятие температуры сохранило некий смысл? Дело в том, что если сделать аккуратный расчёт [1-3], например, с помощью нелинейной сигма-модели в келдышевской технике, то можно увидеть, что перечисленные выше физические величины действительно определяются флуктуациями, имеющими бозонную природу. Более того, это низкочастотные флуктуации. На низких частотах бозе-распределение сингулярно, $N_B = T/\omega$. Эта особенность оказывается очень устойчивой. Вдали от равновесия на низких частотах распределение бозонов имеет похожий сингулярный вид, $N_B = T_{eff}/\omega$, с эффективной температурой электрон-дырочных или флуктуационных купперовских пар.

1. Chtchelkatchev N.M. *et al*, Euro Phys. Lett. **88**, 47001 (2009)
2. Petkovic A., Chtchelkatchev N.M. *et al*, Phys. Rev. Lett. **105**, 187003 (2010)
3. Petkovic A., Chtchelkatchev N.M. *et al*, Phys. Rev. B **84**, 06451 (2011)

Магнитные явления

МАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

~ o ~

ДРЕЙФ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ ВО ВНЕШНЕМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Агафонов Л.Ю.*, Лысов М.С., Памятных Л.А.

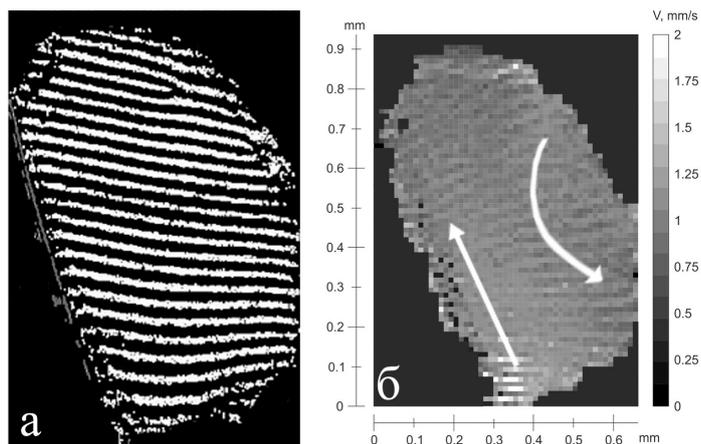
Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия*E-mail: 7Cookie@gmail.com

Рис. 1. а) доменная структура образца; б) распределение скоростей дрейфа по поверхности образца.

Проведено исследование дрейфового движения полосовой доменной структуры в переменном планарном магнитном поле в кристалле-пластине-(111) феррита-граната $(\text{TbErGd})_3(\text{FeAl})_5\text{O}_{12}$ со сложным характером магнитной анизотропии. Визуализация процесса производилась при помощи магнитооптического эффекта Фарадея.

Проведены измерения скорости дрейфа доменных границ в диапазоне частот от 20 до 1000 Гц и амплитуд переменного поля от 0 до 250 Э. При всех исследованных частотах увеличение амплитуды приводит к резкому росту скорости дрейфа до 10 мм/с.

Зависимость скорости дрейфа от амплитуды переменного магнитного поля хорошо аппроксимируется квадратичной зависимостью, что согласуется с теоретическими оценками [1].

Разработан программный метод измерения скорости дрейфа доменных границ V в переменном магнитном поле, основанный на обработке экспериментального видеоряда, позволяющий проводить измерения в разных точках образца. Результаты измерений приведены на рисунке. На рис. 1.б представлено распределение скорости дрейфа по поверхности образца. Средняя по площади скорость дрейфа составила 1.02 мм/с, при этом значения V варьируются в диапазоне от 0.65 до 1.3 мм/с. Установлено, что распределение скорости дрейфа носит периодический характер и имеет вид чередующихся тёмных и светлых полос, не совпадающих по ориентации с магнитными доменами (рис. 1.а).

Методом атомно-силовой микроскопии показано, что периодичность в распределении скоростей дрейфа не связана с рельефом поверхности образца.

С применением разработанного метода изучена связь движения доменов и магнитных дислокаций. О дислокационном механизме дрейфа сообщалось в [2]. В результате проведённого исследования установлено, что в распределении скоростей дрейфа присутствуют градиенты, направленные вдоль траекторий движения магнитных дислокаций (на рис. 1.б показаны стрелками), причём скорость дрейфа уменьшается по мере удаления от центра зарождения магнитных дислокаций.

1. Барьяхтар В.Г., Горобец Ю.И., Денисов С.И., ЖЭТФ, **10**, 1345 (1990)
2. Памятных Л.А., Лысов М.С., Кандаурова Г.С., Известия РАН, серия Физическая, **71**, 1544 (2007)

МАГНЕТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ПОРОШКАХ СПЛАВА $\text{HoCo}_{1.76}\text{Fe}_{0.24}$ Тарасов Е.Н., Осадченко В.Х., Аникин М.С., Зинин А.В.Институт естественных наук Уральского федерального университета
им. Первого президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, РоссияE-mail: Evgeniy.Tarasov@usu.ru

В последнее время большое внимание исследователей привлекает технология магнитного охлаждения, основанная на магнетокалорическом эффекте (МКЭ) магнетиков. В качестве рабочих тел необходимы материалы с большими параметрами МКЭ в широком температурном диапазоне.

В работе [1], при исследованиях соединений $\text{R}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ было обнаружено, что эти материалы, особенно в виде порошков, способны, в малых количествах 1.5-3 ат.%, при нормальных условиях, поглощать атмосферный водород. Примесь водорода приводила к существенным изменениям анизотропных магнитных свойств и кристаллической решётки в исследуемых образцах.

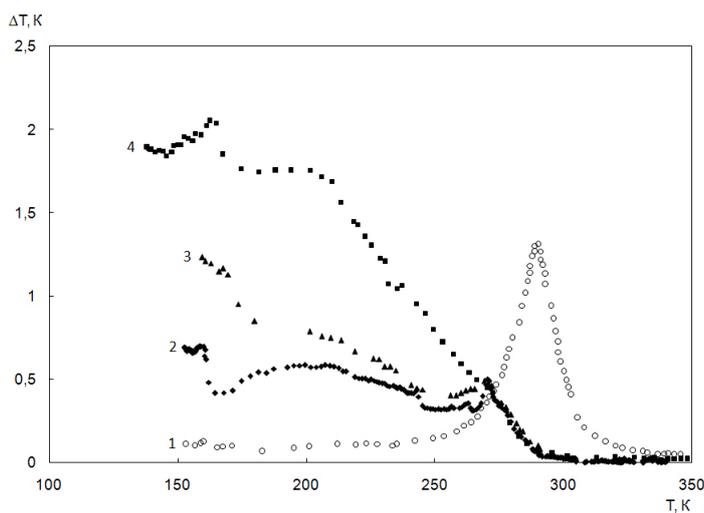


Рис. 1. Температурные зависимости ΔT порошков, Gd (1) и сплава $\text{HoCo}_{1.76}\text{Fe}_{0.24}$, измеренные через 8 недель, после изготовления порошка (2), через 2 года (3), через 3 года (4), при включении-выключении магнитного поля $\mu_0 = 0,46$.

В данной работе, прямым методом исследовалось адиабатическое изменение температуры ΔT , порошков сплава $\text{HoCo}_{1.76}\text{Fe}_{0.24}$, ситовой фракции 200-500 мкм, разного времени выдержки на воздухе. Результаты измерения температурных зависимости ΔT порошков $\text{HoCo}_{1.76}\text{Fe}_{0.24}$ приведены на рис. 1. Для сравнения приведены температурные изменения ΔT_{ad} порошка Gd.

Обнаружен большой МКЭ в малых, до 0,5 Т, значениях индукции магнитных полей, в широком диапазоне температур (150-270) К, расположенном ниже температуры Кюри. Предполагается, что аномальный МКЭ обусловлен поглощением порошками атмосферного водорода. Изменения ΔT могут происходить из-за перемещений атомов водорода в кристаллической ячейке,

под действием магнитоупругих напряжений, при включении-выключении магнитного поля.

1. Королев А.В., Мушников Н.В., Андреев А.В., Гавико В.С., ФММ, 2, 92-97 (1990)

ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ФЕРРОБОРАТА $\text{Sm}_{0.7}\text{Ho}_{0.3}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$

Бегунов А.И., Демидов А.А.* , Кульченков Е.А.

Брянский государственный технический университет, г. Брянск, Россия

*E-mail: demandr@yandex.ru

В последнее время повышающийся интерес к тригональным ферроборатам $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{La} - \text{Lu}$) обусловлен обнаружением в них мультиферроэлектрических свойств [1]. Магнитные моменты Fe в $\text{SmFe}_3(\text{BO}_3)_4$ антиферромагнитно упорядочиваются при $T_N \approx 32$ К и лежат в базисной плоскости ab . Также в ab -плоскости находятся магнитные моменты Sm, подмагниченные обменным полем Fe. В $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ магнитные моменты Fe упорядочиваются при $T_N \approx 38$ К и при понижении до $T_{SR} \approx 4.7$ К лежат в базисной плоскости как и магнитные моменты ионов Ho^{3+} . Затем, при $T_{SR} \approx 4.7$ К происходит спонтанный спин-переориентационный переход, в результате которого магнитные моменты Fe- и Ho-подсистем становятся ориентированными вдоль оси c [1]. Таким образом, при низких температурах в $\text{Sm}_{1-x}\text{Ho}_x\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ возможно возникновение спонтанных и индуцированных магнитным полем спин-переориентационных переходов от оси c к плоскости ab , подобно недавно обнаруженным переходам в $\text{Nd}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ ($x = 0.15, 0.25$) [2, 3]. Данная работа посвящена теоретическому исследованию низкотемпературных магнитных свойств $\text{Sm}_{0.7}\text{Ho}_{0.3}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$, сравнению экспериментальных данных [4] с результатами расчётов и определению параметров соединения.

При расчётах использовался единый теоретический подход, основанный на модели кристаллического поля для редкоземельного иона и приближении молекулярного поля [3, 4]. Актуальные параметры $\text{Sm}_{0.7}\text{Ho}_{0.3}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ определены при сравнении результатов расчёта с экспериментальными данными [4]. Для $\text{Sm}_{0.7}\text{Ho}_{0.3}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ объяснено обнаруженное на эксперименте [4] уникальное для ферроборатов слабоанизотропное поведение магнитных характеристик практически во всем исследованном диапазоне температур. Показано, что в предположении легкоплоскостного характера магнитной подсистемы $\text{Sm}_{0.7}\text{Ho}_{0.3}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ удаётся хорошо описать экспериментальные кривые намагничивания $M_{c,\perp c}(B)$ для $B > 1.2$ Тл, но возникает существенное расхождение теории с экспериментом для кривых восприимчивости $\chi_{c,\perp c}(T)$ при низких температурах, которое можно устранить предположив реализацию, начиная с $B = 0$, антиферромагнитного состояния с отклонёнными магнитными моментами железа от оси c (при $T = 2$ К угол отклонения $\theta \approx 63^\circ$). Предложенный возможный вариант процессов намагничивания в слабых магнитных полях позволил в деталях проанализировать поведение магнитных моментов R- и Fe-подсистем $\text{Sm}_{0.7}\text{Ho}_{0.3}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ и описать нелинейные (при $B < 1.2$ Тл) низкотемпературные кривые $M_{c,\perp c}(B)$, свидетельствующие о наличии фазовых переходов от начальной во флоп-фазу.

Получено хорошее согласие экспериментальных [4] и рассчитанных температурных зависимостей $\chi_{c,\perp c}(T)$ в парамагнитной области температур при $\Theta = -170$ К. Рассмотрение конкурирующих вкладов Sm-, Ho-, и Fe-подсистем в магнитную анизотропию $\text{Sm}_{0.7}\text{Ho}_{0.3}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ с учётом возможного существования трёх типов доменов в кристалле тригональной симметрии показало возможность описания обнаруженных экспериментально аномалий на кривых $\chi_{c,\perp c}(T)$ ниже температуры Нееля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ № 12-02-31007 мол_а.

1. Кадомцева А.М., Попов Ю.Ф., Воробьев Г.П. и др., ФНТ, **36**, 640 (2010)
2. Попов Ю.Ф., Кадомцева А.М., Воробьев Г.П. и др., Письма в ЖЭТФ, **89**, 405 (2009)
3. Демидов А.А., Гудим И.А., Еремин Е.В., ЖЭТФ, **141**, 294 (2012)
4. Демидов А.А., Гудим И.А., Еремин Е.В., ЖЭТФ, **142**, (2012) (в печати)

УЧЁТ СПИНОВОЙ ПОВОРОТНОЙ СИММЕТРИИ В РАМКАХ МЕТОДА LDA+DMFT

Белозеров А.С.^{1*}, Леонов И.В.², Анисимов В.И.¹

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Институт физики Университета г. Аугсбург, Германия

*E-mail: a.belozerov@imp.uran.ru

Теоретическое описание свойств соединений с сильными электронными корреляциями является фундаментальной проблемой современной физики твёрдого тела. В последнее время все большую популярность приобретают методы расчёта электронной структуры из первых принципов. Одной из наиболее эффективных расчётных схем для исследования соединений с сильными электронными корреляциями в настоящее время является метод LDA+DMFT [1]. Данный метод описывает одноэлектронную часть гамильтониана в приближении локальной электронной плотности (LDA), а также учитывает локальную составляющую кулоновского взаимодействия в рамках теории динамического среднего поля (DMFT) [2]. Однако учёт полной формы кулоновского взаимодействия в рамках данного метода требует значительных вычислительных ресурсов. Поэтому большинство современных LDA+DMFT расчётов используют приближённую форму кулоновского взаимодействия, в которой обменное кулоновское взаимодействие используется в изинговой форме. Данное приближение приводит к нарушению поворотной инвариантности кулоновского взаимодействия, которая важна для описания как спектральных, так и магнитных свойств. В частности, это приводит к существенной переоценке температуры магнитного перехода.

Для учёта спиновой поворотной симметрии в рамках DMFT, нами разработан метод, основанный на методе квантового Монте-Карло в алгоритме Хирша-Фая для решения одноприемной модели Андерсона. В основе разработанного метода лежит усреднение по всем возможным направлениям оси квантования, что позволяет учесть как продольные, так и поперечные спиновые флуктуации. Для проверки разработанного метода исследованы магнитные свойства трёх-зонной модели Хаббарда на решётке Бете в пределе бесконечного координационного числа. В данном пределе отсутствуют нелокальные корреляционные эффекты, в результате чего уравнения DMFT становятся точными. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с результатами предыдущих исследований. С помощью разработанного метода исследованы электронная структура и магнитные свойства парамагнитного α железа и никеля.

Для α железа расчёты с использованием приближённой формы Кулоновского взаимодействия с обменом в изинговой форме приводят к существенной переоценке температуры Кюри ($T_C = 2050$ K) по сравнению с экспериментальным значением $T_C = 1043$ K. Учёт спиновой поворотной симметрии приводит к уменьшению температуры Кюри и даёт $T_C = 1260$ K. В случае никеля расчёты с приближённой формой обменного взаимодействия приводят к переоценке температуры Кюри ($T_C = 840$ K) по сравнению с экспериментальным значением $T_C = 631$ K, а с учётом спиновой поворотной симметрии к недооценке ($T_C = 400$ K), что может быть обусловлено нелокальными корреляционными эффектами, пренебрегаемыми в DMFT. Как для α железа, так и для никеля, удалось воспроизвести основные характерные особенности плотностей электронных состояний вблизи уровня Ферми.

1. V. Anisimov et al., Journal of Physics: Condensed Matter **9**, 7359 (1997)

2. A. Georges et al., Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996)

ФОРМИРОВАНИЕ ОДНОНАПРАВЛЕННОЙ АНИЗОТРОПИИ В БИСЛОЯХ $\text{Mn}/\text{Ni}_{77}\text{Fe}_{23}$

Блинов И.В.* , Матвеев С.А., Попов В.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: blinovi@mail.ru

В работе исследовано влияние температуры и времени отжига на формирование упорядоченной антиферромагнитной фазы NiFeMn в бислоях $\text{Mn}/\text{Ni}_{77}\text{Fe}_{23}$. Целью работы являлся поиск оптимальных режимов термомагнитной обработки бислоев, обеспечивающий максимальное обменное сдвиговое поле H_{ex} и минимальное отношение H_c/H_{ex} .

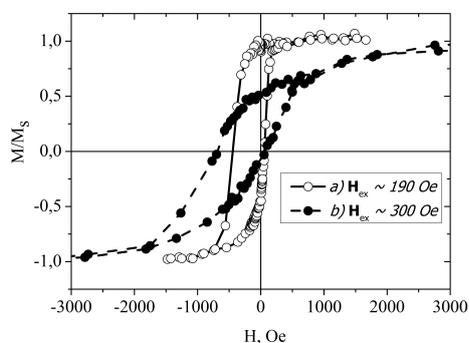


Рис. 1. Петли гистерезиса образцов $\text{Mn}/\text{Ni}_{77}\text{Fe}_{23}$, после отжига в магнитном поле при температуре 260°C в течение 4 часов, напылённых на а) стекло, б) сапфир.

образцов, напылённых на стеклянную и сапфировую подложки, соответственно. Явление однонаправленной анизотропии в исследуемых образцах обусловлено обменным взаимодействием пермаллоя NiFeMn с богатым марганцем антиферромагнитным твёрдым раствором NiFeMn , образовавшимся в результате диффузионного взаимодействия пермаллоя и марганца.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 12-П-2-1051), Президиума РАН (проект по программе Президиума РАН «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов») и частичной поддержке Проекта молодых учёных и аспирантов УрО РАН 2012 г.

Плёнки были получены с помощью электронно-лучевого напыления на установке Varian на подложки из стекла при вакууме 10^{-5} Па. Для предотвращения окисления, полученные плёнки покрывались слоем тантала.

Отжиг исследуемых образцов выполнялся при вакууме 10^{-4} Па в постоянном магнитном поле 2 кЭ, приложенном в плоскости плёнки. Температура отжига варьировалась в интервале $230\text{--}300^\circ\text{C}$, время — в диапазоне 1-4 ч. Магнитные свойства были изучены при помощи вибрационного магнитометра. Магнитное поле при измерении совпадало с направлением поля при отжиге.

Проведённые исследования показали, что оптимальным режимом термомагнитной обработки является отжиг при температуре 260°C в течение 4 часов. При этом H_{ex} составляет 190 Э и 300 Э для

СВОЙСТВА КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ «МАГНИТНАЯ ЖИДКОСТЬ – ВОЗДУШНАЯ ПОЛОСТЬ»

Боев М.Л.

ФГБОУ ВПО «Юго-Западный государственный университет», г. Курск, Россия

E-mail: max-boev@mail.ru

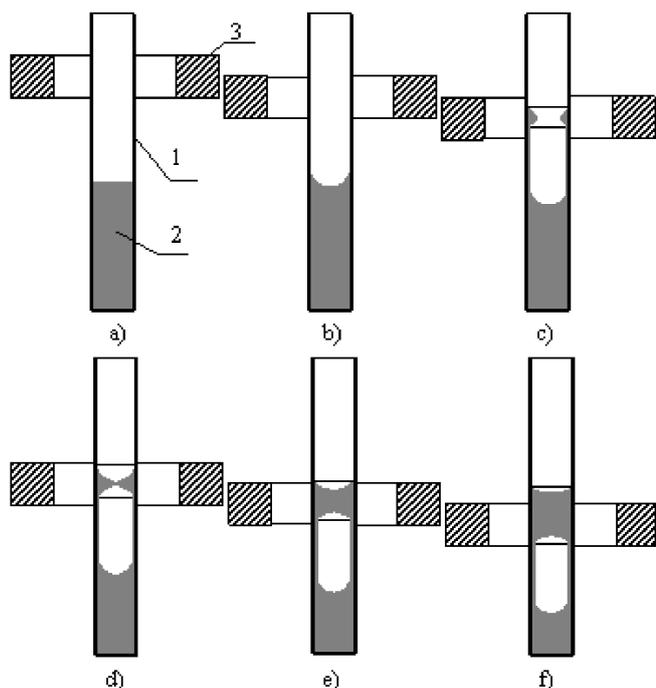


Рис. 1. Процесс захвата воздушной полости магнитной жидкостью.

В опытах используется жёстко закреплённая стеклянная трубка 1, частично заполненная МЖ 2. Закреплённый на кинематическом узле катетометра кольцевой магнит 3 опускается вниз по трубке, при этом оси кольцевого магнита и трубки совмещены между собой.

Рассматриваются упругие и диссипативные свойства колебательной системы, инерционным элементом которой служит столбик магнитной жидкости над воздушной полостью.

Если столбик МЖ, находящийся под воздушной полостью, представляет собой звуковой волновод, то столбик МЖ в трубке, расположенный над воздушной полостью, служит инерционным элементом колебательной системы. Роль упругости в данной колебательной системе выполняет суммарная упругость воздушной полости с коэффициентом упругости k_g и пондеромоторная упругость с коэффициентом упругости k_p .

Из описания устройства колебательной системы и полученных результатов следует так же, что система допускает управление частотой как за счёт массы столбика МЖ, так и за счёт объёма газовой полости.

1. Полунин В.М., Боев М.Л. и др., 15 Международная Плесская научная конференция по магнитным жидкостям: Сборник научных трудов, 58 (2012)

Система «Магнитная жидкость – воздушная полость» образуется за счёт «захвата» воздушной полости магнитной жидкостью (МЖ), заполняющей трубку с доннышком, силами магнитной левитации.

Рассматриваемая нами магнитная левитация заключается в том, что на немагнитное тело, помещённое в МЖ, находящуюся в магнитном поле с градиентом вдоль направления силы тяжести, действует дополнительная выталкивающая сила, которая может многократно превышать вес вытесненной жидкости. Если же градиент напряжённости магнитного поля направлен вертикально вверх, то силы магнитной левитации «утяжеляют» немагнитное тело, препятствуют всплыванию, обеспечивают «зависание» в более плотной жидкой среде.

Процесс «захвата» воздушной полости магнитным полем детально описан в [1]. На рисунке 1 а, b, с, d, e, f отображены основные этапы процесса «захвата» воздушной полости.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ СПОНТАННОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ С ТЕПЛОВЫМ РАСШИРЕНИЕМ И ТЕПЛОЁМКОСТЬЮ УПОРЯДОЧЕННОГО И РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО СПЛАВОВ Fe₃Pt

Болотин К.Е.^{1*}, Подгорных С.М.²

¹Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: rrler@mail.ru

Сплав Fe₃Pt является ферромагнетиком и имеет большой магнитообъёмный эффект, относящий его к инварным сплавам. В зависимости от состояния его температура Кюри изменяется от $T_C = 400$ К (для разупорядоченного сплава) до $T_C = 500$ К (для упорядоченного).

Коэффициент теплового расширения (КТР) имеет большую отрицательную магнитную составляющую, которая проявляется вблизи T_C . Дополнительно к особенностям вблизи T_C коэффициент теплового расширения для упорядоченного сплава имеет особенность при низких температурах в районе $T = 50$ К. Природа этой аномалии связывалась ранее с существованием антиферромагнетизма ГЦК железа (γ -железо), однако доказательств существования антиферромагнетизма нет.

В работе проведена проверка проявления изменения магнитного состояния при низких температурах на спонтанной намагниченности и сделана попытка описать наблюдаемую аномалию КТР с помощью полученных ранее соотношений [1, 2] как для теплоёмкости:

$$C_{mag} = A \frac{dM_s^2}{dT} + B \frac{dM_s^4}{dT}, \quad (1)$$

так и для коэффициента теплового расширения:

$$\beta_{mag} = a \frac{dM_s^2}{dT} - b \frac{dM_s^4}{dT}. \quad (2)$$

В работе исследовались два образца Fe₃Pt: упорядоченный (упорядочение атомов Fe по узлам ГЦК решётки Pt) и разупорядоченный.

Состав	Состояние	m , мг	T_C , К	Θ_D , К	a	b	A , Дж/моль	B , Дж/моль
Fe ₃ Pt	Упр.	51.9	473	305	0.45	0	0.09	0
Fe ₃ Pt	Разупр.	89.4	380	330	1.35	$9 \cdot 10^{-6}$	0.12	0

Таблица 1. Основные характеристики образцов

Были исследованы температурные зависимости магнитных вкладов в КТР и теплоёмкость в температурном диапазоне от 4 до 350 К.

Установлено, что для разупорядоченного образца магнитный вклад в КТР содержит производные от второй и четвёртой степени спонтанной намагниченности и хорошо описывается ранее полученным выражением (2). Однако магнитный вклад в теплоёмкость образцов описывается только одной производной от квадрата спонтанной намагниченности. Обсуждается причина преобладания одного из механизмов в тепловых свойствах сплава Fe₃Pt, связанная с магнитной неустойчивостью атомов железа.

1. Подгорных С.М., Казанцев В.А., ФММ, **109**, №3, 267 (2010)

2. Podgornykh S.M., Bolotin K.E., Solid State Phenomena, **168-169**, 153 (2011)

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНОГО ГИСТЕРЕЗИСА В АНСАМБЛЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЗЁРЕН ИНТЕРМЕТАЛЛИДА $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ПРИ НАЛИЧИИ МЕЖЗЁРЕННОГО ОБМЕННОГО И МАГНИТОСТАТИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Болячкин А.С.*, Волегов А.С.

Кафедра магнетизма и магнитных наноматериалов, Институт естественных наук,
Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: anton.bolyachkin@mail.ru

Компьютерное моделирование, в частности, микромагнитные расчёты, являются важным инструментом в решении как прикладных, так и фундаментальных задач магнетизма. Особенно актуальны вычисления данного класса при исследованиях магнитных свойств наноматериалов, что определяется как интересом к последним, так и тем, что закладываемые в компьютерные модели предположения и допущения в большей степени справедливы именно для них, нежели для микрообъектов [1].

В настоящей работе объектом компьютерных экспериментов выступает поликристалл высокоанизотропного интерметаллида $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, размер зёрен которого на практике варьируется в пределах 10 – 100 нм. Высокое значение спонтанной намагниченности и одноосная магнитокристаллическая анизотропия данного соединения позволяет получать в промышленных объёмах на его основе постоянные магниты с величиной максимального энергетического произведения до 50 МГсЭ, что определяет интерес к соединению.

Компьютерная модель наноструктурированного поликристалла $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ представляет собой ансамбль однодоменных наноразмерных зёрен, каждое из которых имеет форму равномерно намагниченного куба. Процесс намагничивания и перемагничивания осуществляется за счёт вращения вектора намагниченности. Равновесное положение магнитного момента зерна определяется из локального минимума его энергии, в которую входит энергия магнитокристаллической анизотропии, энергия кристаллита во внешнем магнитном поле, энергия межзёренного обменного и магнитостатического взаимодействия зёрен.

Написана компьютерная программа, позволяющая проводить компьютерный эксперимент по построению предельных и частных петель гистерезиса, определению магнитной восприимчивости, температурных зависимостей остаточной намагниченности, кривых Хенкеля ($\delta M(H)$, [2]), основанных на сравнении процессов намагничивания и перемагничивания исследуемого объекта с таковыми, базирующимися на модели Стонера-Вольфарта.

Для изотропного ансамбля одноосных однодоменных частиц на основе компьютерной модели исследовано влияние межзёренного обменного взаимодействия на зависимость продольной и поперечной магнитной восприимчивости от магнитного состояния системы. Проведено сопоставление с экспериментальными данными.

Показано, что наличие межзёренного обменного взаимодействия приводит к отклонению зависимости $\delta M(H)$ в область положительных значений от соотношений Вольфарта-Кондорского. Подтверждается предположение о том, что величина пика $\delta M(H)$ пропорциональна энергии межзёренного обменного взаимодействия.

1. Aharoni A., Physica B, **306**, 1-9 (2001)
2. Gao R.W., Zhang D.H., Li W., Li X.M., Zhang J.C., Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **208-1**, 239 (2000)

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОЙ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ СОЕДИНЕНИЙ
 $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_x\text{Al}_{0.12-x})_{13}$ МЕТОДОМ ЭФФЕКТА МЁССБАУЭРА

Вершинин А.В.*, Сериков В.В., Клейнерман Н.М., Мушников Н.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

На сегодняшний день известно о существовании только одного бинарного соединения с типом структуры NaZn_{13} . Этим соединением является LaCo_{13} . Соединения LaFe_{13} можно получить путём частичного замещения атомов Fe немагнитными атомами, такими как Si или Al. Расчёты с использованием парных межатомных потенциалов показывают, что Al и Si способствуют стабилизации структуры типа NaZn_{13} [1]. Соединения $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_x\text{Al}_{1-x})_{13}$ имеют сложную магнитную фазовую диаграмму [2]. Если в данной системе зафиксировать концентрацию железа и проводить замещение алюминия на кремний, можно получить концентрационный переход из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние. Помимо концентрационного, в представленной системе имеет место температурный фазовый переход. В то же время до сих пор не ясно, почему при близких концентрациях легирующего компонента соединения с алюминием – антиферромагнетики, а с кремнием – ферромагнетики.

Для выяснения природы такого перехода нами были измерены мёссбауэровские спектры при температуре 100 К [3]. Установлено, что антиферромагнитные составы характеризуются преимущественно положительным квадрупольным сдвигом, а ферромагнитные – отрицательным. Предложена модель формирования магнитной структуры, которая объясняет возникновение слоистого антиферромагнитного упорядочения в соединениях $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_x\text{Al}_{1-x})_{13}$.

Магнитный переход из антиферромагнитного состояния в ферромагнитное может быть связан как с изменением магнитной, так и кристаллической структур. Чтобы исключить влияние магнитного упорядочения, мёссбауэровские спектры были измерены при температуре выше магнитного упорядочения системы [4]. Результаты расчёта спектров показали, что процесс замещения атомов Fe на атомы Si отличается от процесса замещения на атомы Al. В представленных соединениях атомы Al распределяются статистически, тогда как атомы Si показывают тенденцию к локальному упорядочению. Различие в формировании локального окружения в исследованных сплавах может быть связано с тем, что величина потенциала эффективного парного взаимодействия в сплавах Fe-Si в 2 раза больше, чем в Fe-Al.

1. Chang H., Chen N., Liang J., Rao G., J. Phys.: Condens. Matter **15**, 109 (2003)
2. Podgornykh S.M., Shcherbakova Ye.V., Makarova G.M., Yermakov A.A., Abstracts of Euro-Asian Symposium EASTMAG – 2007 «Magnetism on a nanoscale», Kazan, 23-26 August 2007, p. 166.
3. Сериков В.В., Клейнерман Н.М., Вершинин А.В., Мушников Н.В., ФММ, (2012) (в печати)
4. Сериков В.В., Клейнерман Н.М., Вершинин А.В., Мушников Н.В., Гавико В.С., ФТТ, (2012) (в печати)

МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕЖЗЁРЕННОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Nd – Fe – В ВБЛИЗИ СОСТАВА ФАЗЫ ТИПА Nd₂Fe₁₄B

Волегов А.С.*, Кудреватых Н.В., Болячкин А.С.

УрФУ имени первого Президента России Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: aleksey.volegov@gmail.com

Среди функциональных магнитных материалов особое место занимают магнитотвёрдые материалы, изделия из которых представляют собой источники постоянных магнитных полей без затрат энергии. Научно-технический прогресс и связанная с ним миниатюризация исполнительных механизмов технических устройств предъявляют повышенные требования к энергоёмкости постоянных магнитов и условиям их эксплуатации, обеспечить которые могут лишь редкоземельные магнитотвёрдые материалы [1].

Дальнейшее улучшение свойств магнитотвёрдых материалов может быть достигнуто за счёт:

- 1) совершенствования технологии изготовления постоянных магнитов системы Nd – Fe – В;
- 2) поиска и нахождения новых многокомпонентных (5 и более химических элементов) магнитных фаз с более высокими величинами, чем у фазы Nd₂Fe₁₄B, спонтанной намагниченности и одноосным типом магнитокристаллической анизотропии;
- 3) создания технологий получения магнитотвёрдых материалов с текстурированными обменно-связанными структурными элементами из магнитотвёрдой и магнитомягкой фаз наноразмерного масштаба.

Наиболее перспективным, несмотря на технологические трудности и фундаментальные проблемы (виды и механизмы физических воздействий на сплав для получения текстуры нанозёрен, величина параметра межзёренного обменного взаимодействия и др.), является создание магнитотвёрдых материалов на основе текстурированных обменно-связанных систем из фазовых образований, разнородных по магнитной твёрдости

Перед разработкой такой технологии должен быть решён ряд фундаментальных задач:

- 1) определение зависимости фундаментальных магнитных характеристик (M_s , K , T_c) интерметаллида Nd₂Fe₁₄B от размера зёрен и физических причин такой зависимости;
- 2) разработка физических основ методов оценки энергии межзёренного обменного взаимодействия;
- 3) разработка физических основ получения текстурированных нанокристаллических сплавов системы Nd – Fe – В достехиометрического по редкоземельному элементу состава относительно стехиометрической пропорции соединения типа Nd₂Fe₁₄B.

Цель настоящей работы заключается в разработке методов оценки величины энергии межзёренного обменного взаимодействия в сплавах системы Nd – Fe – В.

Методы оценки энергии межзёренного обменного взаимодействия в случае высокоанизотропного интерметаллида Nd₂Fe₁₄B основаны на анализе температурных зависимостей намагниченности во внешних магнитных полях различной напряжённости. Отличительной особенностью указанного интерметаллида, позволяющей проводить оценку этой энергии, является спонтанный спин-переориентационный переход типа ось лёгкого намагничивания – конус осей лёгкого намагничивания.

Подробное описание методов будет приведено в докладе.

Исследование проведено при финансовой поддержке молодых учёных УрФУ в рамках реализации программы развития УрФУ.

РОСТ КРИСТАЛЛОВ НАТРИЕВЫХ КОБАЛЬТАТОВ Na_xCoO_2 МЕТОДОМ БЕСТИГЕЛЬНОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКИ С ОПТИЧЕСКИМ НАГРЕВОМ

Гильмутдинов И.Ф. *, Петров С.В., Мухамедшин И.Р.

Институт физики, Казанский Федеральный Университет, Россия

*E-mail: Ildar.Gilmutdinov@gmail.com

Соединения натриевых кобальтатов Na_xCoO_2 обладают целым рядом интересных физических свойств. На фазовой диаграмме представлены области, соответствующие магнитоупорядоченным состояниям, области, в которых наблюдаются переходы металл-диэлектрик и переход в сверхпроводящее состояние. При содержании натрия $x > 0.75$ было обнаружено несколько антиферромагнитно-упорядоченных фаз с температурами перехода 22 К, 9 К и 29 К [1], а также волны спиновой и зарядовой плотности [2].

Исследования физических свойств натриевых кобальтатов сдерживаются сложностью приготовления и хранения образцов. Высокая летучесть и подвижность натрия приводят к значительному испарению компонента в процессе синтеза, что, в свою очередь, может нарушить исходный состав соединения и привести к фазовому расслоению. В данной работе представлена методика приготовления поликристаллических образцов и синтеза кристаллов натриевого кобальтата $\text{Na}_{0.75}\text{CoO}_2$ методом бестигельной зонной плавки с оптическим нагревом.

На первом этапе было получено поликристаллическое соединение $\text{Na}_{0.8}\text{CoO}_2$ из порошков Na_2CO_3 (99.95%) и Co_3O_4 (99.7%) методом твердофазного синтеза. На втором этапе поликристаллическая заготовка была помещена в ростовую установку FZ-T-4000-H-VII-VPO-PC (Crystal Systems Corp) и экспериментально были подобраны условия, необходимые для стабильного роста кристалла. На рис.1 представлена фотография выращенного кристалла.

Рис. 1. Кристалл натриевого кобальтата $\text{Na}_{0.75}\text{CoO}_2$.

Исследование выращенного кристалла методом порошковой дифрактометрии показало, что кристаллическая структура кристалла соответствует соединению Na_xCoO_2 . Измерение температурной зависимости намагниченности образца показали, что содержание натрия в выращенном кристалле соответствует $x = 0.75$, а магнитные примеси отсутствуют.

1. Sugiyama J., Brewer J., Phys. Rev. Lett., **92**, p.017602 (2004)
2. Motohashi T., Ueda R., Naujalis E., Tojo T., Phys. Rev. B, **67**, 064406 (2003)

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОГО СМЕЩЕНИЯ В СЛОИСТЫХ ПЛЁНОЧНЫХ СТРУКТУРАХ ТИПА FeNi/FeMn с ГРАНУЛИРОВАННОЙ ПРОСЛОЙКОЙ Co – Al₂O₃

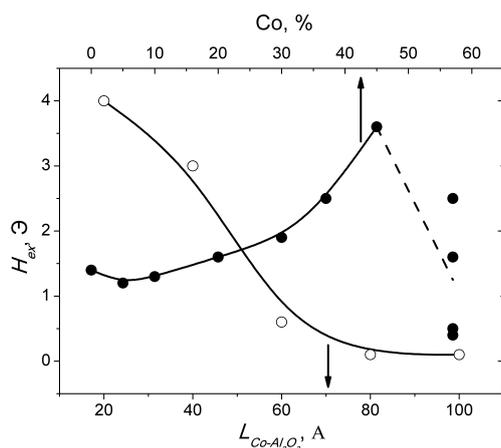
Горьковенко А.Н.*, Лепаловский В.Н., Савин П.А., Васьковский В.О.

УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ИЕН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: angorkovenko@gmail.com

Эффект магнитного смещения, состоящий в обменном подмагничивании магнитомягких слоёв со стороны прилегающих слоёв с закреплённой магнитной структурой, – один из инструментов создания устройств спинтроники на основе многослойных магнитных плёнок. Величина эффекта зависит от многих параметров и выявление общих закономерностей формирования магнитного смещения требует обширного экспериментального материала, что определяет направленность данного исследования.

Образцы многослойных плёнок были получены методом магнетронного распыления на установке Orion-8. Магнитные свойства плёнок измерялись магнитооптическим методом и с помощью вибромагнитометра.



Предварительный эксперимент, состоявший в варьировании порядка осаждения слоёв пермаллоя, сплава FeMn и тантала показал, что однонаправленная анизотропия стабильно реализуется только в структуре 1 – Ta/FeNi/FeMn. В рамках выбранной структуры были определены зависимости поля магнитного смещения (H_{ex}) и коэрцитивной силы (H_c) слоя пермаллоя от толщин всех слоистых составляющих. В результате была найдена структура Ta(5)/FeNi(20)/FeMn(20) (в скобках указана толщина слоёв в нанометрах), обнаруживающая максимальную величину магнитного смещения.

Также нами были исследованы возможности реализации магнитного смещения в дополнительном поверхностном слое пермаллоя. Изучалась структура 2 – Ta(5)/FeNi(L_{FeNi})/FeMn(20)/FeNi(20) с фиксированными толщинами всех слоёв, кроме толщины внутреннего слоя пермаллоя L_{FeNi} . Эксперимент показал, что магнитное смещение во втором (поверхностном) слое возникает при $L_{FeNi} > 2$ нм и с ростом толщины первого (внутреннего) слоя пермаллоя до 20 нм обнаруживает тенденцию к нарастанию. Наиболее сложным объектом исследования была структура 3 – Ta(5)/FeNi(5)/FeMn(20)/FeNi(20)/Co – Al₂O₃/FeNi(20), которая формировалась на основе структуры 2 путём добавления прослойки Co – Al₂O₃ и третьего слоя пермаллоя. Как оказалось, в этом слое тоже может быть реализовано магнитное смещение. На рисунке показаны зависимости H_{ex} третьего слоя пермаллоя от состава (чёрные точки, верхняя шкала) и толщины (белые точки, нижняя шкала) прослойки. Монотонное убывание поля смещения с ростом толщины прослойки и его увеличение при возрастании содержания кобальта до концентрации $\sim 45\%$, а также резкое падение H_{ex} при большем содержании кобальта, по-видимому, отражают толщинные и концентрационные изменения параметров гранулированной среды Co – Al₂O₃, описанные, в частности, в работе [1].

1. Gorkovenko A.N, Vas'kovskiy V.O., Lepalovskij V.N., Shchegoleva N.N., SSP, **190**, 474 (2012)

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ В МАГНЕТИКАХ С МОДУЛЯЦИЕЙ МАГНИТНЫХ ПАРАМЕТРОВ

Гумеров А.М.*, Кудрявцев Р.В., Муртазин Р.Р., Богомазова О.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

*E-mail: bgu@bk.ru

Одним из теоретических направлений исследования влияния дефектов на магнитные неоднородности является учёт, в рамках термодинамической теории, возможности пространственной зависимости параметров материала. Хотя имеется хорошо разработанная теория возмущений для этого уравнения [1], для случая произвольных изменений параметров материала необходимо использовать численные методы [2]. Есть и экспериментальные работы, исследующие изменение структуры доменной границы (ДГ) при пересечении дефекта (см. например [3]). Представляет интерес изучение динамики ДГ в ферромагнетиках с произвольной по величине одномерной модуляцией магнитных параметров, в том числе, и с точки зрения возбуждения и излучения нелинейных волн (см. рис. 1).

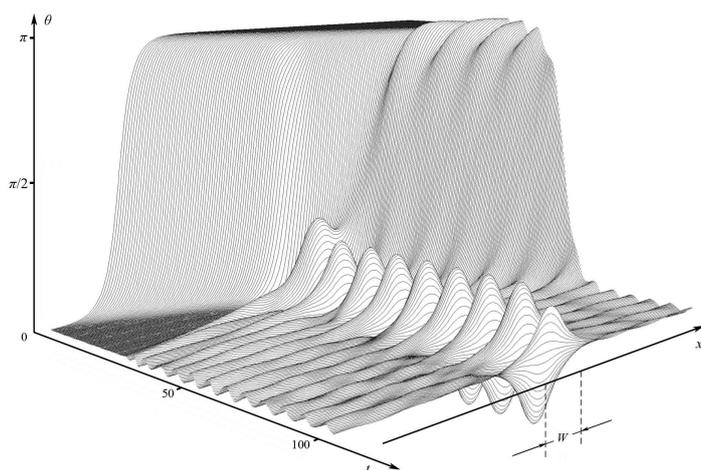


Рис. 1. Возбуждение и эволюция локализованной магнитной неоднородности типа «бризер» в результате прохождения ДГ через область НКМА (обозначена пунктирными линиями). $\theta = \theta(x, t)$ – угол между вектором ферромагнетизма и осью лёгкого намагничивания.

кинка и бризера. В пределе небольших амплитуд колебаний «бризеров» аналитически был рассчитан характер взаимодействия, который с хорошей точностью соответствует численным результатам.

Работа поддержана грантом РФФИ 10-02-00594-а.

1. Браун О.М., Кившарь Ю.С., Модель Френкеля-Конторовой: Концепции, методы, приложения. М.: Физматлит (2008)
2. Екомасов Е.Г., Азаматов Ш.А., Муртазин Р.Р., ФММ **105**, 341 (2008)
3. Четкин М.В., Курбатова Ю.Н., ФТТ **43**, 1503 (2001)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ГИПЕРЗВУКА В ТРЁХСЛОЙНОЙ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЕ

Дианов М.Ю.^{1*}, Власов В.С.¹, Котов Л.Н.¹, Шавров В.Г.², Щеглов В.И.²¹Сыктывкарский Государственный Университет, г. Сыктывкар, Россия²Институт радиотехники и электроники РАН, г. Москва, Россия*E-mail: dianovmy@yandex.ru

Задача возбуждения ультразвуковых колебаний с помощью магнитострикционных преобразователей издавна привлекает внимание исследователей [1-2]. Перспективным является использование магнитострикционных преобразователей в акустоэлектронике, где высокая механическая добротность ферритовых резонаторов (до 10^7 при исследовании железно-иттриевого граната (ЖИГ)) позволяет создать высокоэффективные устройства обработки информации в диапазоне СВЧ ($f - 10^9 \dots 10^{11}$ Гц).

Исследование возбуждения гиперзвука с помощью магнитоакустических преобразователей в нормально намагниченном ферритовом диске было проведено в работе [1]. Несмотря на отсутствие ограничения, связанного с параметрическим распадом, решение в [1] получено в линейном приближении, что не позволяет оценить максимальную эффективность возбуждения при сильном сигнале. Некоторые особенности нелинейного приближения затронуты в работах [2,3], однако проведённое там рассмотрение, направленное в первую очередь на описание качественной картины, является неполным и не позволяет выявить ограничения и определённые возможности возбуждения гиперзвука.

Данная работа посвящена количественному рассмотрению задачи возбуждения гиперзвука в трёхслойной структуре в наиболее общем нелинейном случае, не накладывающем ограничения на мощность возбуждающего сигнала. Была задана трёхслойная структура, состоящая из слоев с различными магнитными и одинаковыми упругими свойствами и с произвольными толщинами. Основными уравнениями задачи были уравнение Ландау-Лифшица в форме Гильберта и уравнение для упругих смещений. Граничные условия для упругих смещений были заданы непрерывностью напряжений и упругих смещений на границе различных слоев. Для решения задачи, упругие смещения были разложены на две компоненты: однородную и неоднородную часть. Неоднородная часть была найдена из граничных условий, а однородная часть была разложена в ряд Фурье по собственным функциям однородной задачи, при этом рассматривалась только первая мода упругих колебаний. Таким образом, была получена нелинейная система обыкновенных дифференциальных уравнений. Полученная система уравнений решалась численно, методом Рунге-Кутты 4-5 порядка. Были построены графики зависимости компонент намагниченности и компонент упругих колебаний от времени. При расчёте использовались параметры материала, типичные для монокристалла железно-иттриевого граната. Материальные параметры и толщина структуры были заданы таким образом, чтобы при отсутствии магнитоупругой связи при линейных колебаниях, резонансные частоты однородной прецессии и первой моды упругих колебаний совпадали. Полученные зависимости были сравнены с аналогичным случаем, но для однослойной пластины [4]. Так же были получены резонансные кривые в линейном и нелинейном случае и проведён их анализ.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (номер гранта 12-02-01035-а).

1. Ле-Кроу Р., Комсток Р. Физическая акустика. Т. 3Б. Динамика решётки /Под ред. У. Мэзона. М.: Мир, 156 (1968)
2. Власов В.С. Исследование релаксационных и нелинейной динамики магнитных и магнитоупругих колебаний плёнок и частиц. Дис. Канд. Физ.-мат. Наук. М.: МГУ, 149 (2007)
3. Карпачев С.Н., Власов В.С., Котов Л.Н. Вестник МГУ. Сер. 3, №6, 60 (2006)
4. Власов В.С., Котов Л.Н., Шавров В.Г., Щеглов В.И.. Радиотехника и электроника **54**, 863 (2009).

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА $\text{Ni}_{2.19-x}\text{Fe}_x\text{Mn}_{0.81}\text{Ga}$

Дробосюк М.О.*, Бучельников В.Д., Файзуллин Р.Р., Таскаев С.В., Соколовский В.В.,
Павлухина О.О.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

*E-mail: m.syuk@mail.ru

Магнитокалорическим эффектом (МКЭ) называется изменение температуры вещества при его адиабатическом намагничивании. МКЭ был открыт Эмилем Варбургом в 1881 году.

Ранее проведённые нами исследования [1] показали, что сплавы Гейслера Ni_2MnGa имеют большие значения МКЭ вблизи комнатных температур. Мы решили рассмотреть влияние добавления 4-ого элемента в трёхкомпонентный сплав.

В данной работе мы представляем результаты измерений низкополевой намагниченности, а также МКЭ для сплавов Гейслера $\text{Ni}_{2.19-x}\text{Fe}_x\text{Mn}_{0.81}\text{Ga}$ ($x = 0; 0.01; 0.02; 0.03; 0.04$). Измерения намагниченности проводились на оригинальном магнитометре VKAF-02. Измерения МКЭ проводились прямым методом на установке для измерения МКЭ фирмы АМТ&С.

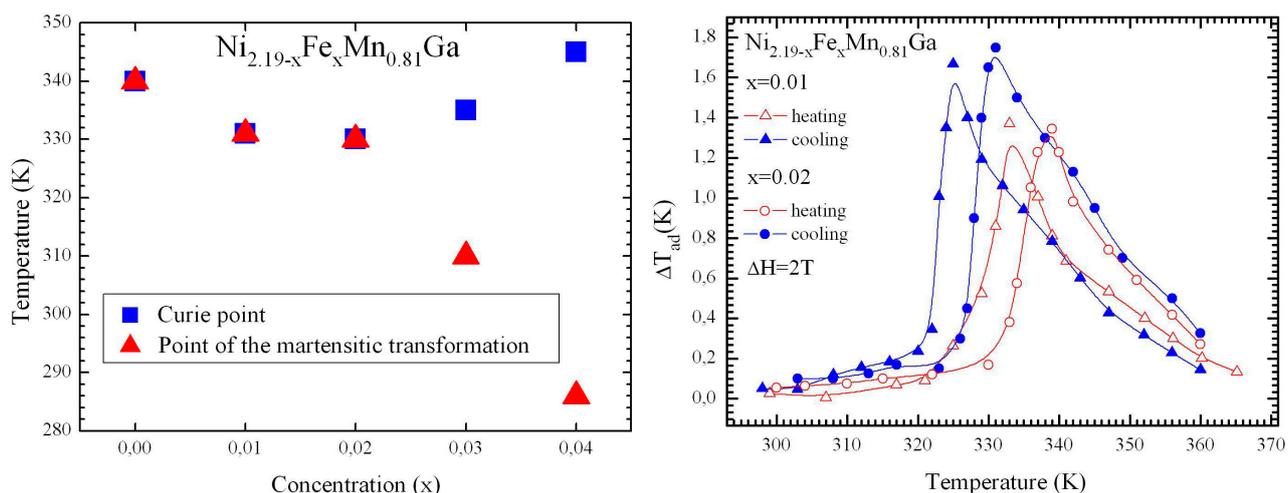


Рис. 1. Фазовая диаграмма сплавов Гейслера $\text{Ni}_{2.19-x}\text{Fe}_x\text{Mn}_{0.81}\text{Ga}$ ($x = 0; 0.01; 0.02; 0.03; 0.04$) (слева). МКЭ сплавов Гейслера $\text{Ni}_{2.19-x}\text{Fe}_x\text{Mn}_{0.81}\text{Ga}$ ($x = 0.01; 0.02$) (справа).

По результатам измерений низкополевой намагниченности ($H \sim 0.035$ Тл) была построена фазовая диаграмма изучаемых сплавов, которая представлена на рисунке 1 (слева).

Результаты измерений МКЭ для сплавов Гейслера $\text{Ni}_{2.19-x}\text{Fe}_x\text{Mn}_{0.81}\text{Ga}$ ($x = 0.01; 0.02$) при нагревании и охлаждении представлены на рисунке 1 (справа).

Максимальное значение МКЭ $\Delta T_{ad} = 1,6$ К получено на образце $\text{Ni}_{2.18}\text{Fe}_{0.01}\text{Mn}_{0.81}\text{Ga}$ при температуре $T = 325$ К.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ МК-6278.2012.2, гранта РФФИ 11-02-00601 и гранта ФЦП № 14.740.11.1442.

1. Buchelnikov V.D., Drobosyuk M.O. et al., Solid State Phenomena, **168-169**, 165 (2010)

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСПЕРСИОННОГО СОСТАВА МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Епифанов Ю.А, Елфимова Е.А.*

Институт математики и компьютерных наук, Уральский федеральный университет,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: Ekaterina.Elfimova@usu.ru

Магнитные жидкости представляют собой устойчивые коллоидные дисперсии ферро-частиц в жидкости носителе. Основной особенностью феррожидкостей является возможность управления их свойствами при помощи магнитного поля, сохраняя при этом их жидкое состояние. Благодаря этому факту, феррожидкости активно применяются в различных высокотехнологичных производствах, медицине, и ведётся активное изучение их свойств.

Данная работа посвящена теоретическому исследованию дисперсионного состава магнитных жидкостей в сильном гравитационном поле. На основе экспериментальных результатов по измерению магнитной восприимчивости, теоретически были определены концентрационный профиль и дисперсионный состав магнитной жидкости. Магнитная жидкость моделировалась бидисперсной системой дипольных твёрдых сфер с постоянными магнитными моментами. Частицы каждой фракции имели одинаковый диаметр и величину магнитного момента. Каждая феррочастица характеризовалась радиус-вектором положения её центра масс, и вектором, определяющим ориентацию её магнитного момента. Парные взаимодействия между частицами описывались суммой потенциалов твёрдосферического и диполь-дипольного взаимодействия. В условиях термодинамического равновесия, в отсутствие внешнего магнитного поля из условия равенства гравитационного и диффузионного потоков определялся профиль концентрации феррочастиц в рассматриваемом объёме. Диффузионный поток зависел от концентрации магнитных частиц и от интенсивности диполь-дипольного взаимодействия. Для описания стерических взаимодействий использовалась аппроксимация Карнагана-Старлинга для дипольных твёрдых сфер. Для изучения диполь-дипольных межчастичных взаимодействий, свободная энергия дипольных твёрдых сфер представлялась в виде вириального ряда до квадратичного слагаемого по концентрации [1]. Предполагалось, что частицы каждой фракции взаимодействуют как между собой, так и с частицами другой фракции. Используя известную зависимость между концентрацией и магнитной восприимчивостью, был построен профиль магнитной восприимчивости, который сопоставлялся с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке МОН проект № 2.609.2011.

1. Pshenichnikov A.E., Elfimova E.A., Ivanov A. O., Journal of Chemical Physics, **134**, 184508 (2011)

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ОБРАБОТОК НА МИКРОСТРУКТУРУ, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГЕТЕРОГЕННЫХ ВЫСОКОКОЭРЦИТИВНЫХ СПЛАВОВ SmGdZrCoCuFe

Иванов Р.П. *, Кабанов С.С.

ФГБОУ «Тверской государственный университет», г. Тверь, Россия

*E-mail: riv69@bk.ru

Наиболее перспективными для высокотемпературных применений являются постоянные магниты типа SmZrCoCuFe , которые наряду с достаточно высокими значениями максимального энергетического произведения $(BH)_{\max} = 30\text{-}38$ МГс·Э характеризуются высокой температурной стабильностью характеристик благодаря величине температуры Кюри более 800°C . Исследованиям структуры и магнитных свойств сплавов и порошковых постоянных магнитов данного типа посвящено большое число работ [1-3]. Однако целый ряд вопросов, касающихся кинетики формирования структуры, особенностей процессов перемагничивания и механизмов магнитного гистерезиса остаются до конца не выясненными.

В работе изучается влияние микро- и наноструктуры на гистерезисные характеристики гетерогенных сплавов SmGdZrCoCuFe . Исследования проведены методами оптической, электронной и сканирующей зондовой микроскопии, а также методами магнитных измерений. Исследования проводились на литых образцах полученных методом индукционной плавки, представлявших собой одно зерно сплава. Методами магнитных измерений, оптической, электронной и атомно-силовой микроскопии проведены комплексные исследования влияния структурного состояния на основные магнитные характеристики гетерогенных сплавов $(\text{Sm}_{1-x}\text{Gd}_x)\text{Zr}_{0.15}(\text{Co}_{0.690}\text{Cu}_{0.088}\text{Fe}_{0.222})_{6.0}$. Показано, что увеличение длительности изотермического отжига до 24 часов приводит к росту коэрцитивной силы и максимального энергетического произведения литых образцов. Максимальные значения коэрцитивного поля для всех режимов ТО получены на составах с равным относительным содержанием самария и гадолиния. Определены стехиометрические соотношения для структурных составляющих сплавов. Установлено, что в процессе термических обработок относительное содержание элементов в составляющих остаётся практически неизменным. Экспериментально установлено, что относительно интегрального состава сплава lamellar выделения обогащены цирконием, структурная составляющая типа 1 ÷ 5 – медью, 2 ÷ 17 – железом. Показано, что причиной высококоэрцитивного состояния сплавов $(\text{Sm}_{1-x}\text{Gd}_x)\text{Zr}_{0.15}(\text{Co}_{0.690}\text{Cu}_{0.088}\text{Fe}_{0.222})_{6.0}$ является наличие «ячеистой» наноструктуры с характерным размером 50-100 нм.

1. Супонев Н.П., Семенова Е.М., Ляхова М.Б., Синекоп В.И., Куртанов Н.И. Физика и химия обработки материалов, **3**, 48 (2011)
2. Tang W., Zhang Y., Goll D., Hadjipanayis G.C., Kronmüller H. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **226-230**, 1365 (2001)
3. Lyakhova M.B., Semenova E.M., Pastushenkov Yu.G., Pastushenkov A.G., Sinekop V.I. and Zezyulina P.A. Solid State Phenomena, **168-169**, 400 (2011)

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА И КОНКУРЕНЦИЯ МАГНИТНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В γ -ЖЕЛЕЗЕ

Игошев П.А.^{1*}, Ефремов А.В.¹, Катанин А.А.^{1,2}, Потеряев А.И.¹, Анисимов В.И.^{1,2}

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Уральский Федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

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

Для теоретического исследования магнитных флуктуаций в парамагнитном γ -железе применялась комбинация первопринципных расчётов и моделирования в рамках динамической теории среднего поля в широком диапазоне температур T . Экспериментально γ -железо обладает аномально большим для антиферромагнетика соотношением Вильсона–Зоммерфельда $W_R \equiv (\pi^2 k_B^2 \chi) / (3\mu_B \gamma) \sim 25$ [1,2] (χ — магнитная восприимчивость, γ — коэффициент Зоммерфельда в низкотемпературной теплоёмкости), что указывает на присутствие сильных ферромагнитных флуктуаций в этой системе (большой «стонеровский» фактор усиления). С другой стороны, вычисленная статическая магнитная восприимчивость имеет максимум на волновом векторе $\mathbf{q}_\chi = (1, 0, 0)2\pi/a$, где a — параметр гранецентрированной кубической (гцк) решётки. Этот результат согласуется с типом наблюдаемого антиферромагнитного дальнего порядка в γ -железе при низкой температуре (помещённом как микрокристаллы в медную матрицу).

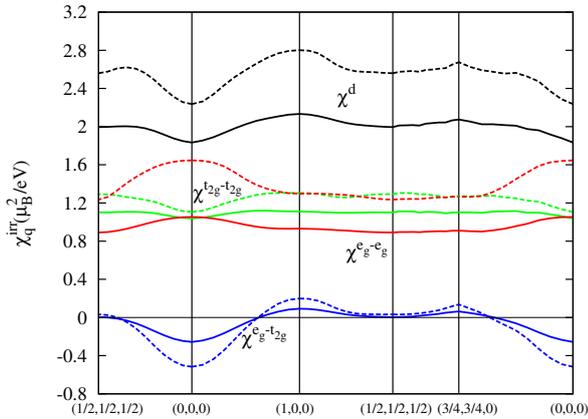


Рис. 1. Импульсная зависимость χ_q^{irr} для d -орбиталей, а также различных вкладов в χ_q^{irr} в зоне Бриллюэна, полученная при $T = 1289 \text{ K} = 12(1/eV)$. Штриховая линия — результат, полученный с использованием кон-шэмовских-спектров, сплошная линия — результат динамической теории среднего поля.

Гейзенберга, также обсуждаются.

Работа частично поддержана проектами РФФИ (№ 12-02-31510) и Президиума УрО РАН (№ М-9).

1. M. C. Gao, T. A. Bennett, A. D. Rollett and D. E. Laughlin, J. Phys. D: Appl. Phys. **39**, 2890 (2006)
2. K. P. Gupta, C. H. Cheng, and P. Beck: J. Chem Solids, **25**, 73 (1964)

Тот факт, что вычисленная магнитная восприимчивость имеет минимальное значение на нулевом волновом векторе, соответствующем ферромагнитным флуктуациям (см. рис. 1), вместе с большим значением W_R представляет значительный интерес, так как указывает на сильнейшую конкуренцию магнитных флуктуаций различного типа в γ -железе. Как видно из рис. 1, причиной резкого подавления «ферромагнитного» вклада в спектре магнитных флуктуаций является отрицательный гибридационный e_g-t_{2g} -вклад в неприводимую в частично-дырочном канале магнитную восприимчивость χ_q^{irr} , обеспечивающий провал при $\mathbf{q} = 0$. В свою очередь, сам гибридационный вклад происходит вследствие геометрии гцк решётки, что объясняет наличие именно антиферромагнитного порядка в гцк-металлах $3d$ -периода (γ — Fe, γ — Mn).

Эффективные обменные интегралы, полученные сопоставлением с результатами для модели

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Cr}_2\text{S}_4$

Кирдянкин Д.И.^{1*}, Ефимов Н.Н.¹, Диденко В.Д.², Мельников А.А.², Тюлюмджиев Э.А.²

¹)Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, г. Москва, Россия

²)НИТУ МИСиС, г. Москва, Россия

*E-mail: kird.den@rambler.ru

Работа посвящена изучению магнитных свойств твёрдых растворов $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Cr}_2\text{S}_4$, где крайними составами являются полупроводниковые шпинели – ферромагнетик CdCr_2S_4 и антиферромагнетик ZnCr_2S_4 с температурами упорядочивания $T_C = 86$ К ($x = 0$) и $T_N = 18$ К ($x = 1$), соответственно.

Интерес к изучению этой системы вызван в первую очередь относительной простотой описания поведения магнитных свойств, так как содержание единственного магнитного иона Cr^{3+} во всем интервале составов остаётся постоянным, хотя и происходит изменение магнитного упорядочения с ферро- до антиферромагнетика. Мы считаем, что такое изменение вызвано конкурирующими силами взаимодействия ионов Cr-Cr в зависимости от расстояния между ними. Так как в CdCr_2S_4 значение ионного радиуса по Шеннону-Превитту замещаемого иона $R_{\text{Cd}^{2+}} = 0.95$ Å, а в ZnCr_2S_4 – $R_{\text{Zn}^{2+}} = 0.74$ Å, предполагалось, что при последовательном замещении будет уменьшаться расстояние Cr-Cr, и, вместе с этим, уменьшается ферромагнитное взаимодействие, тогда как антиферромагнитное становится все больше.

Действительно, полученные данные РФА синтезированных по методу твердофазной реакции образцов $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Cr}_2\text{S}_4$ говорят о равномерном уменьшении расстояния Cr-Cr с 3.622 до 3.531 Å; параметр элементарной решётки Fd3m линейно уменьшается с 10.244 до 9.987 Å по закону Вегарда.

Магнитные измерения однофазных образцов проводили на магнетометре PPMS-9 в температурном интервале 2-300 К в постоянном поле (100 Э) и переменном поле (100-1000 Гц), а также измеряли гистерезис при температуре 4 К в интервале полей -50 – 50 кЭ. Построение кривых Белова-Аррота показало наличие непрерывного ферромагнитного кластера вплоть до состава с $x = 0.27$. Это позволило более точно нарисовать магнитную фазовую диаграмму, в которой наблюдаются узкие области ферромагнетика и антиферромагнетика, а также широкий интервал составов с состоянием спинового стекла (СС). В состоянии СС наблюдается близость обменных интегралов для ферро- и антиферромагнитного взаимодействия. Однако присутствие намагниченности насыщения на полевых зависимостях говорит о ферромагнетизме данных составов вплоть до $x = 0.7$, но носящего уже кластерный характер.

В работе изучено изменение парамагнитных характеристик в зависимости от замещения, а значит и от расстояния между магнитными ионами. Также была изучена область ферромагнетизма, изменение магнитного момента и температуры Кюри от состава, а в области существования спинового стекла была предложена кластерная модель описания магнитных свойств и рассчитаны размеры и намагниченности кластеров по Ланжевену. Предложена модель статистической и угловой конформации спинов магнитных моментов октаэдрического иона в шпинельной структуре, которая описывает поведение магнитного момента насыщения в зависимости от состава.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных исследований (проекты № 12-03-00550 и 12-03-31276), Фонда Президента Российской Федерации по поддержке ведущих научных школ (НШ-1670.2012.3) и Министерства образования и науки Российской Федерации (ГК-8437).

ПОЛУЧЕНИЕ МАССИВНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ РЗМ-(3d – Me)-В ИЗ ИХ ПОРОШКОВ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОШОКОВОГО КОМПАКТИРОВАНИЯ

Комаров Ф.А.*, Кудреватых Н.В., Андреев С.В., Маркин П.Е., Волегов А.С.

Кафедра магнетизма и магнитных наноматериалов, Институт естественных наук,
Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: filippkomarov@mail.ru

Энергоёмкие постоянные магниты на протяжении последних 30 лет изготавливаются на основе интерметаллида $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, что обусловлено как высоким значением спонтанной намагниченности последнего, так и одноосной магнитокристаллической анизотропией. Для постоянных магнитов такого типа экспериментально достигнуто значение максимального энергетического произведения равное 59,6 МГсЭ, в то время как теоретический предел составляет 64 МГсЭ [1]. Наиболее перспективным способом дальнейшего увеличения $(BH)_{max}$ постоянных магнитов является создание нанокристаллических магнитотвёрдых материалов на основе текстурированных обменно-связанных систем из фазовых образований, разнородных по магнитной твёрдости.

В настоящей работе была исследована возможность получения массивных образцов постоянных магнитов из порошков наноструктурированного сплава системы РЗМ-3d-металл-бор на основе фазы типа $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ без использования полимерных или металлических легкоплавких связующих. Для достижения поставленной задачи был выбран метод электрошокового компактирования (ЭШК) порошков, а также изготовлена установка для реализации данного метода в лабораторных условиях.

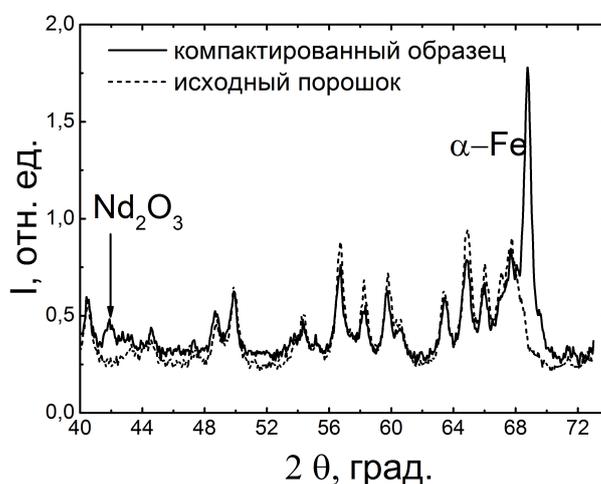


Рис. 1. Рентгенограммы сплавов до и после ЭШК.

Установлено, что выбор оптимального сочетания параметров методики ЭШК позволяет получать механически прочные компакты из исходного порошка наноструктурированного сплава марки МQP-В+ практически без увеличения размера зёрен фазы $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Тем не менее, в результате химического взаимодействия между частицами порошка и адсорбированным кислородом, в полученных компактах образуются фазы состава Nd_2O_3 и $\alpha\text{-Fe}$ (Рис. 1), что значительно снижает магнитные свойства образцов.

1. Matsuura Y., Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **303**, 344-347 (2006)

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ОТЖИГА НА ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЁНОК $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Tb}-\text{Co}$ И $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Ti}/\text{Tb}-\text{Co}$ С ОДНОНАПРАВЛЕННОЙ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

Кулеш Н.А.*, Васьковский В.О., Балымов К.Г., Свалов А.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: kuleshnik@list.ru

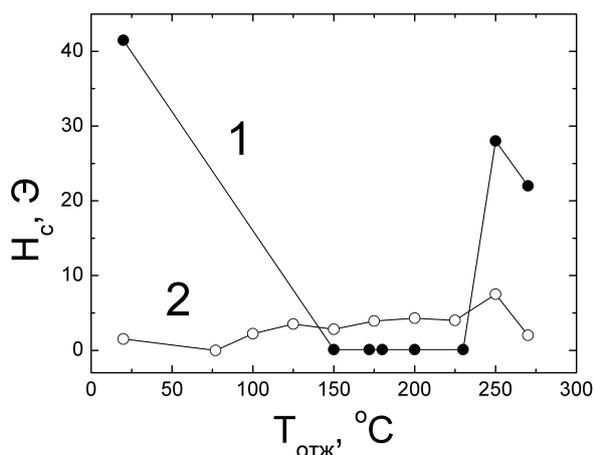


Рис. 1. Зависимости коэрцитивной силы слоя FeNi в составе плёнок $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$ (кривая 1) и $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Ti}(0,7\text{ нм})/\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$ (кривая 2) от температуры отжига.

Тонкие магнитные плёнки на основе обменно-связанных ферромагнитных и антиферромагнитных слоёв являются объектом повышенного интереса благодаря эффекту обменного смещения и возможности его применения в спинтронике [1]. Сильное межслойное взаимодействие формирует в ферромагнитном слое так называемую однонаправленную анизотропию, которая наряду с коэрцитивной силой является параметром чувствительным к состоянию межслойного интерфейса. Целью настоящей работы является изучение влияния модификации интерфейса в виде введения немагнитной прослойки на коэрцитивную силу H_c и поле магнитного смещения H_e магнитомягкого слоя.

В работе исследованы магнитные свойства обменно-связанных слоёв $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$ с немагнитной прослойкой Ti и без неё. Образцы были получены методом магнетронного распыления, одноосная магнитная анизотропия слоя Tb-Co формировалась путём приложения внешнего магнитного поля напряжённостью 150 Э во время осаждения. Толщины магнитных слоёв Tb-Co и FeNi составляли 110 и 50 нм, соответственно.

Для системы $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$ была получена серия петель гистерезиса при комнатной температуре после каждого этапа ступенчатого отжига, проводимого при температурах от 90 до 250°C в течение одного часа. Аналогичные измерения были выполнены на плёнке $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Ti}(0,7\text{ нм})/\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$. Введение прослойки Ti толщиной 0,7 нм, согласно полученным ранее результатам [2], позволяет снизить H_c слоя пермаллоя, оставив величину H_e при комнатной температуре на прежнем уровне. В результате было показано, что введение прослойки Ti приводит к практически монотонному изменению H_c и H_e слоя пермаллоя с температурой и повышает критическую температуру отжига, после которой наблюдается резкое падение H_e и рост H_c (зависимости для H_c приведены на рисунке 1).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 11-02-00288-а).

1. O'Grady K., Fernandez-Outon L.E., Vallejo-Fernandez G., J.Magn.Magn.Mater. **322**, 883 (2010)
2. Kulesh N.A., Balymov K.G., Sorokin A.N., Vas'kovskiy V.O., Solid State Phenomena, **190**, 451 (2012)

МАГНИТОРЕФРАКТИВНЫЙ ЭФФЕКТ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ МАНГАНИТОВ

Лапина Ю.В.^{1*}, Телегин А.В.², Степанцов Е.А.³¹Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия³Институт кристаллографии РАН, г. Москва, Россия*E-mail: julylap@yandex.ru

Исследование структур на основе манганитов с колоссальным магнитосопротивлением (МС) интересно в связи с обнаружением в них гигантского магниторефрактивного эффекта (МРЭ) на пропускании и отражении света – эффектов магнитопропускания (МП) и магнитоотражения (МО). Ранее основные особенности МРЭ были изучены в кристаллах и тонких плёнках манганитов [1-3]. В плёночных гетероструктурах манганитов МРЭ был изучен слабо. Вместе с тем известно, что электрические и магнитные свойства гетероструктур сильно зависят от параметров интерфейсного слоя [4]. Целью настоящей работы было исследование особенностей МРЭ и влияния искусственно созданного интерфейса на магнитооптические и электрические свойства гетероструктур манганитов.

В работе было исследовано два типа гетероструктур: **I** – $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$ ($d = 70\text{нм}$)/ $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ (90нм) и **II** – с диэлектрической немагнитной прослойкой $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$ ($d = 70\text{нм}$)/ SrTiO_3 (2нм)/ $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ (90 = нм), выращенные методом импульсного лазерного осаждения на подложке SrTiO_3 . Оптические свойства изучались в ИК-области спектра при нормальном падении неполяризованного излучения.

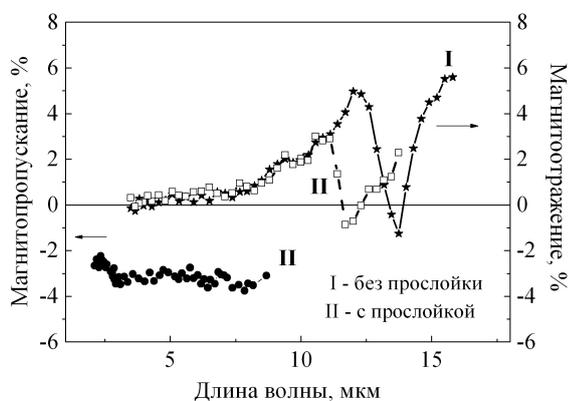


Рис. 1. Спектральные характеристики МП и МО для гетероструктур манганитов.

Было обнаружено, что эффекты МО и МП в гетероструктурах могут достигать гигантских значений (рис.1), сравнимых с величинами эффектов в плёнках. Однако величины МО и МП сильно зависят от магнитной и зарядовой однородности слоев гетероструктур. Так, по сравнению с однослойными плёнками для гетероструктур характерна: (1) большая зарядовая и магнитная неоднородность, (2) меньшая величина намагниченности и T_C , (3) меньшая прозрачность и величина МП, (4) более широкий температурный диапазон для всех магнитооптических эффектов. Наличие прослойки SrTiO_3 в гетероструктуре приводит к появлению низкотемпературного МС, связанного с туннелированием спинполяризованных электронов через прослойку, изменению величины резонансного вклада в МО, но не отражается на МП структуры.

Полученные данные были удовлетворительно объяснены в рамках теории МРЭ для металлов и гранулярных систем [2,3].

Работа была поддержана грантом РФФИ 10-02-00038, программами ОФН РАН и Президиума РАН.

1. Gan'shina E., Loshkareva N., Sukhorukov Yu. et al., J. Magn. Magn. Mater., **300**, 62 (2006)
2. Грановский А.Б., Сухоруков Ю.П., Телегин А.В. и др., ЖЭТФ, **139**, 90 (2011)
3. Сухоруков Ю.П., Телегин А.В., Грановский А.Б., и др., ЖЭТФ, **138**, 402 (2010)
4. Сухоруков Ю.П., Лошкарева Н.Н. и др., ФММ, **107**, 622 (2009)

МАГНИТНЫЕ ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ (Nd, Pr) – (Fe, Co) – В ВБЛИЗИ ФАЗОВОГО СОСТАВА Nd₂Fe₁₄B ПРИ «ГЕЛИЕВЫХ» ТЕМПЕРАТУРАХ

Незнахин Д.С. *, Волегов А.С., Кудреватых Н.В., Андреев С.В.

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: Neznakhin88@mail.ru

Устойчивый процесс расширения областей применения функциональных материалов выдвигает повышенные требования к их потребительским свойствам. Эта тенденция напрямую относится и к магнитотвёрдым материалам (МТМ), которые все чаще используют при экстремальных условиях эксплуатации (высокая и низкая температура, различные механические нагрузки, сильные размагничивающие поля и т.д.). При «работе» МТМ при комнатной и повышенной температурах тепловое воздействие порой настолько значительно, что не позволяет изучить влияние других факторов на их гистерезисные свойства. Поэтому важное место занимают исследования МТМ при низких температурах, которые необходимы как для оценки их потребительских свойств, так и для проверки теоретических представлений о процессах намагничивания и перемагничивания МТМ.

Для магнитных материалов хорошо известен эффект Баркгаузена, который заключается в необратимом перемагничивании областей магнитного материала и проявляется в скачкообразном изменении намагниченности на кривых намагничивания и перемагничивания. Помимо скачков Баркгаузена, в магнитных материалах встречаются эффекты очень на них похожие, но наблюдаемые только при низких температурах [1-3].

В настоящей работе проведено исследование магнитных свойств промышленно выпускаемых порошков быстрозакалённых сплавов системы R-Me-B (R=Nd,Pr; Me=Fe,Co) (марки MQR-B, MQR-B+ и MQR-16-7) в области низких («гелиевых») температур и под действием гидростатического давления.

Структура полученных сплавов исследована методами рентгеноструктурного анализа. Магнитные свойства изучены с помощью магнитоизмерительной установки MPMS-XL-7 EC с первичным преобразователем на основе СКВИДа.

Обнаружено, что процесс перемагничивания наноструктурированных сплавов системы (Nd,Pr)-(Fe,Co)-B при температуре 2 К сопровождается скачками намагниченности, подобными скачкам Баркгаузена.

Первые скачки на предельной кривой размагничивания при уменьшении напряжённости внешнего магнитного поля становятся заметны в полях близких к коэрцитивной силе исследуемых сплавов. В работе проведены оценки объёмов материала перемагничивающихся скачком.

Представляется, что скачком перемагничиваются одновременно несколько десятков изолированных частиц порошкового ансамбля. Проверка ранее разработанных моделей о природе таких скачков для микрокристаллических спечённых магнитов показала их неадекватность по отношению к исследованным наноструктурированным сплавам.

Обнаружен рост коэрцитивной силы наноструктурированных сплавов на основе фазы Nd₂Fe₁₄B в области температур 2÷300 К при приложении гидростатического давления, связанный с возможным увеличением констант магнитокристаллической анизотропии этой фазы вследствие изменения межатомных расстояний.

1. Otani Y., Miyajima R et al., J.Appl.Phys., **63**, 3316-3318 (1988)
2. Otani Y., Miyajima R. et al., IEEE Trans. Magn., **25**, 3421-3433 (1989)
3. Baranov N.V., Sinitsyn E.V. et al., JMMM., **130**, 133-137 (1994)

ВЛИЯНИЕ ИЗГИБНЫХ ДЕФОРМАЦИЙ СПИРАЛЬНОГО ДОМЕНА НА ЕГО УСТОЙЧИВОСТЬ

Мальцев В.Н.¹, Нестеренко А.А.^{1*}, Пампура Е.М.²

¹Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

²Уральская государственная сельскохозяйственная академия, г. Екатеринбург, Россия
*E-mail: anna.nesterenko.urfu@yandex.ru

В магнитных плёнках ферритов-гранатов при помещении их в переменное магнитное поле образуются динамические доменные структуры (ДДС) [1], в частности можно выделить образование динамических магнитных доменов в форме спирали.

В работе [2] были получены выражения для энергии доменов в форме архимедовой спирали. Однако приведённые в них выражения были приближенными и справедливыми для многовитковых спиралей. Используемые приближения не позволяют рассмотреть все механизмы разрушения спирального домена. Кроме того, в этой модели поле не менялось со временем.

В работе [3] проведены расчёты для СД, находящегося в знакопеременном синусоидальном поле; для случаев, когда поле не меняется, в этой модели было получено соответствие результатам [2]. Приведённые теоретические исследования расходятся с экспериментом: в отсутствие поля спираль растёт неограниченно, а на практике при выключении поля спираль «замораживается». Также и в тех, и в других исследованиях нет объяснения, почему в экспериментах при периодическом изменении поля внешний размер спирали меняется незначительно. В обеих моделях разрушение СД при большой величине поля происходит за счёт уменьшения длины домена, т.е. внешнего радиуса спирали, а в малых полях СД превращается в полосовую структуру. А в экспериментах [4] было установлено, что разрушение СД в больших полях обусловлено, скорее всего, не уменьшением его размера, а разрушением внутреннего ядра спирали.

Для объяснения этих экспериментальных результатов была предложена модель, в которой были введены дополнительные внутренние степени свободы – искажение доменной границы и изменение ширины домена. В рамках диссипативной модели были получены уравнения, описывающие изменение внешнего размера СД, его ширины и амплитуды изгиба волны. Было показано, что с ростом поля уменьшается амплитуда изгиба домена и его ширина при незначительном уменьшении внешнего радиуса. При уменьшении поля возрастают амплитуда изгиба и ширина домена, а внешний размер спирали меняется мало.

Таким образом, в рамках предлагаемой модели получает объяснение неизменность внешнего размера спирали при осцилляциях внешнего поля. Кроме того, в рамках этой же модели можно объяснить и разрушение спирали в полях с большой амплитудой за счёт разрушения внутреннего ядра спирали. В случае свободного внутреннего конца спирали уменьшение длины СД может происходить не только за счёт уменьшения внешнего радиуса спирали, но и за счёт движения внутреннего конца спирали, при неизменном положении внешнего.

1. Кандаурова Г.С., УФН, **172**, 1165 (2002)
2. Борисов А.Б., Ялышев Ю.И., ФММ, **79**, 18 (1995)
3. Мальцев В.Н., Картагулов Л.Н., ФММ, **98**, 1 (2004)
4. Пашко А.Г. Конфигурации динамических доменных структур и процессы перемагничивания пленок ферритов-гранатов, УрГУ (2009)

СПИНОВЫЙ ПЕРЕХОД В СОЕДИНЕНИИ LaCoO_3

Новоселов Д.Ю.* , Коротин Д.М., Анисимов В.И.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Соединение LaCoO_3 уже на протяжении полувека является объектом интереса многих исследователей [1-3]. На сегодняшний день один из основных открытых вопросов заключается в том, какие атомные мультиплеты отвечают за формирование локальных магнитных моментов на ионе Co ?

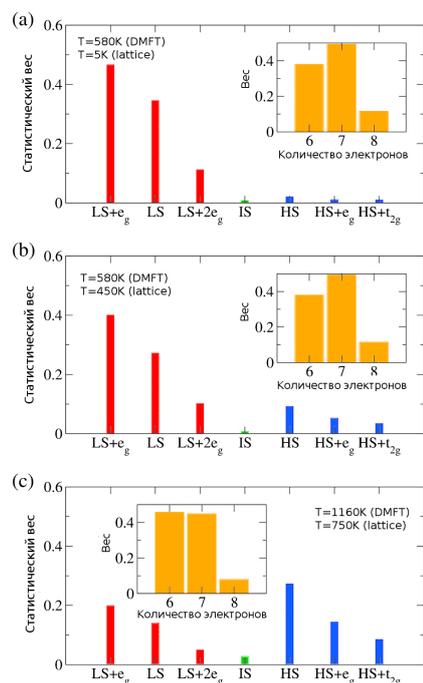


Рис. 1. Статистические веса доминирующих атомных состояний. Здесь первое значение температуры соответствует температуре в методе DMFT, второе – экспериментальным структурным данным [5].

Данная работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект РФФИ № 10-02-00046).

1. Heikes R.R., Miller R.C., and Mazelsky R., *Physica* **30**, 1600 (1964)
2. Raccah P.M. and Goodenough J. B., *Phys. Rev.* **155**, 932 (1967)
3. Korotin M.A., Ezhov S. Y., Solovyev I. V. et al., *Phys. Rev. B* **54**, 5309 (1996)
4. Anisimov V.I., Poteryaev A.I., Korotin M.A. et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 7359 (1997)
5. Radaelli P.G. and Cheong S.-W., *Phys. Rev. B* **66**, 094408 (2002)

В поисках ответа на этот вопрос была применена комбинация методов теории функционала плотности и теории динамического среднего поля DFT+DMFT [4]. Был разработан и реализован алгоритм, позволяющий проводить статистический анализ состава атомных состояний. Для учёта сильной ковалентной связи между ионами Co и O высокоспиновое (HS) состояние иона Co было обобщено на случай, включающий не только $d6$, а также $d7$ и $d8$ электронные конфигурации. Именно наличие в смеси состояний $d7$ и $d8$ обуславливает снижение величины эффективного HS момента до значения порядка $3.5\mu_B$.

Результаты проведённых исследований позволяют предложить следующее описание физики перехода в соединении LaCoO_3 . При самых низких температурах LaCoO_3 находится в низкоспиновом состоянии LS с некоторым количеством изолированных ионов Co в возбуждённом HS состоянии (Рис. 1(a)). Рост температуры, сопровождающийся положительной обратной связью со стороны решётки, приводит к возрастанию количества узлов в HS состоянии (Рис. 1(b)) и формированию ближнего HS-LS порядка, который ответственен за изоляторное поведение в диапазоне температур 100-500 К.

Второй переход вблизи 500 К ассоциируется с разрушением HS-LS порядка, что приводит к аномальному расширению решётки. Экспериментально наблюдаемый переход в металлическую фазу меняет характер локального момента смеси состояний, схожего с промежуточно спиновым IS, на доминирующую HS конфигурацию (Рис. 1(c)).

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ НАМАГНИЧЕННОСТИ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Иванов А.А.¹, Орлов В.А.^{2*}, Орлова И.Н.²

¹Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, Россия

²Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева,
г. Красноярск, Россия

*E-mail: orlhome@rambler.ru

Для решения проблемы повышения плотности магнитной записи перспективными являются композитные материалы на основе немагнитной матрицы с инкапсулированными ферромагнитными вставками в форме вытянутых цилиндров – нанопроволок. Основным механизмом перемагничивания нанопроволок является процесс смещения доменных стенок (ДС) [1,2]. Отдельная нанопроволока в матрице находится в поле, создаваемом всем массивом. Это поле провоцирует движение ДС, и способствует этому тепловая «тряска».

В настоящей работе мы теоретически исследуем процесс движения ДС в поле дефектов с учётом взаимодействия магнитной подсистемы с термостатом. В этой модели нанопроволока представляет собой одномерную цепочку плотно упакованных ферромагнитных кристаллитов, длина и диаметр которых малы по сравнению с $\delta_0 = \sqrt{AK}$, A и K – константы обмена и анизотропии, соответственно. Движение стенки осуществляется в одномерном случайном силовом рельефе, создаваемом магнитными неоднородностями.

Основная цель работы – поиск среднего времени жизни намагниченности нанопроволоки. Для ее реализации решена вспомогательная задача по вычислению плотности вероятности перехода доменной стенки из некоторой начальной координаты фазового пространства $\{z, U, t\}$ в конечную к произвольному моменту времени. Здесь z – координата ДС вдоль оси проволоки, U – высота потенциального барьера, создаваемого магнитными неоднородностями, t – момент времени. Для оценки времени потери информации мы полагали, что нанопроволока условно сохраняет намагниченность, пока доменная стенка не сместилась на расстояние, превышающее половину длины проволоки L . Используя элементы химической кинетики, были проведены оценки этого времени для некоторых частных случаев.

1. Энергия активации (высота барьеров) не является случайной:

$$\tau = (\mu L)^{1.48} / (2\pi\nu).$$

2. Высоты барьеров распределены по нормальному закону. Высокотемпературный предел:

$$\tau = (\mu L)^{1.48} / \sqrt{2\pi\nu^2 \exp(3U_0/(2kT))}.$$

3. Энергия активации определяется неоднородностями магнитной кристаллографической анизотропии при случайной ориентации локальных осей анизотропии:

$$\tau = (\mu(kT)^{0.03} / \nu) \exp\left(-2HM_S / (4.7Kb^{1.45}) + b^{\frac{1}{14}} - 0.7/kT\right).$$

В этих выражениях введены обозначения: $b = a/\delta_0$, μ – линейная плотность барьеров, L – длина проволоки, ν – частота попыток срыва ДС с барьера, H – величина внешнего поля, M_S – намагниченность насыщения, T – температура, U_0 – средняя высота барьеров.

Полученные выражения позволяют предсказать характерное время жизни намагниченности нанопроволок в зависимости от их структуры. Применяемый метод расчёта переходной вероятности универсален и позволяет проводить расчёты для неоднородностей разных типов: флуктуации параметров анизотропии, обмена, шероховатости поверхностей и пр.

1. Henry Y., Iovan A., George J.-M., Piroux L., Phys. Rev. B **66**, 184430 (2002)

2. Bahiana M., Amaral F. S., Allende S., Altbir D., Phys. Rev. B **74**, 174412 (2006)

МАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ И МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ ИНТЕРКАЛИРОВАННЫХ СОЕДИНЕНИЙ Fe_xTiS_2

Проскура Е.П.^{1*}, Прошкин А.В.^{1,2}, Шерокалова Е.М.¹, Селезнёва Н.В.¹, Баранов Н.В.^{1,2}

¹)Институт естественных наук, Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²)Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: eprosk@gmail.com

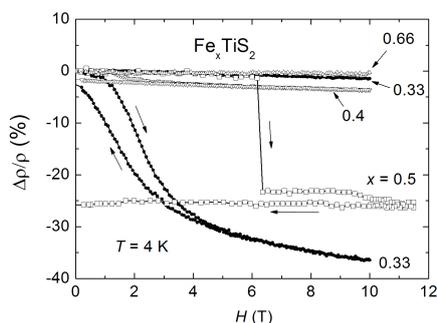


Рис. 1. Полевые зависимости магнитосопротивления соединений Fe_xTiS_2 с различным содержанием внедрённых атомов Fe при температуре 4 К.

Соединения Fe_xTiS_2 являются примером квазидвумерных систем, в которых атомы железа в виде моноатомного слоя располагаются между трёхслойными немагнитными блоками сера-титан-сера. В результате упорядочения внедрённых атомов и вакансий в слое в интеркалированных соединениях могут формироваться различные сверхструктуры. Интеркалированные дихалькогениды переходных металлов интересны разнообразием физических свойств: переходами металл-полупроводник, переходами в сверхпроводящее состояние и в состояния с волной зарядовой плотности, наличием различных магнитных состояний [1].

Для большинства соединений Fe_xTiS_2 получены температурные зависимости сопротивления металлического типа, при понижении температуры выявлены аномалии, связанные с изменением магнитного состояния. Под действием магнитного поля в некоторых соединениях при низких температурах обнаружен большой магниторезистивный эффект (рис. 1). Для состава $\text{Fe}_{0.5}\text{TiS}_2$ в магнитном поле ~ 6 Тл наблюдается резкое падение электросопротивления ($\Delta\rho/\rho \sim -25\%$), что обусловлено фазовым переходом из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние. Большие значения магнитосопротивления (около -37%) были обнаружены и для состава $x=0.33$, где также наблюдается упорядочение атомов железа и вакансий и, по-видимому, формируется антиферромагнитная структура. Для промежуточных составов $\text{Fe}_{0.25}\text{TiS}_2$, $\text{Fe}_{0.4}\text{TiS}_2$ и $\text{Fe}_{0.66}\text{TiS}_2$, в которых полное упорядочение атомов Fe и вакансий отсутствует, мы получили малые значения магнитосопротивления. Можно предположить, что в этих соединениях реализуется смешанное неоднородное магнитное состояние, представляющее собой смесь областей с ферро- и антиферромагнитным упорядочением. Полученные данные свидетельствуют о тесной связи магнитных и магнито-транспортных свойств с особенностями кристаллической структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 12-03-31156 мол_a) и Программы Минобрнауки РНП.2.1.1.1682.

1. Баранов Н.В., Плещев В.Г., Титов А.Н., Максимов В.И., Селезнева Н.В., Шерокалова Е.М., Нанотехника, **15**, 15 (2008)

НАМАГНИЧЕННОСТЬ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ МАГНЕТИКОВ С СИЛЬНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

Прошкин А.И.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: al.pro@list.ru

В 70-80е годы прошлого столетия был открыт новый класс ферро- и антиферромагнитных материалов со структурой NaCl, называемых монопниктидами и монохалькогенидами лантаноидов и актинидов. Если в классических магнетиках большое магнитное поле полностью подавляет анизотропию, то есть намагниченность насыщения не зависит от направления магнитного поля, то для нового класса магнитных материалов максимально достижимых на сегодняшний день полей для подавления анизотропии недостаточно. Как следствие, намагниченность насыщения монокристаллов имеет разную величину в зависимости от направления магнитного поля. По оценке Фогта [1], для переориентации намагниченности в них из различных кристаллографических направлений на направление внешнего магнитного поля потребуются поля порядка миллиона эрстед, недоступные в настоящее время. Кривые намагниченности в таких кристаллах «не могут быть представлены функцией Бриллюэна» [1], которая получается при использовании изотропного гамильтониана Гайзенберга, и поэтому мы используем предельно анизотропные модели Поттса [2].

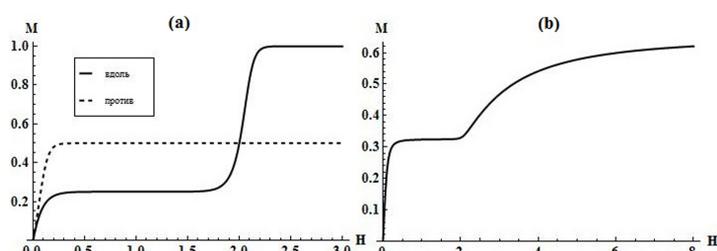


Рис. 1. Кривая намагниченности в 3-х вершинной антиферромагнитной модели Поттса. (а) случай монокристалла, (б) случай поликристалла.

насыщения зависит от направления магнитного поля, причём она равна магнитному моменту только вдоль оси лёгкого намагничивания. Отсюда следует, что намагниченность насыщения поликристалла будет меньше магнитного момента (рисунок 1б).

В работе рассчитано температурное поведение намагниченности в сильно анизотропных 3-, 4-, 6- и 8- вершинных моделях Поттса, получены аналитические значения асимптот намагниченности.

Работа выполнена при поддержке проекта интеграционных фундаментальных исследований УрО РАН № 12-И-2-2020.

1. Vogt O., Physica, B+C **102**, 206-211 (1980)
2. Kassin-Ogly F.A., Phase Transitions **72**, 223-237 (2000)

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НИЗКОРАЗМЕРНОЙ СИСТЕМЫ NaV_2O_4

Пчелкина З.В.^{1*}, Соловьёв И.В.², Арита Р.³

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Национальный институт материаловедения, г. Цукуба, Япония

³Университет Токио, г. Токио, Япония

*E-mail: pzv@ifmlrs.uran.ru

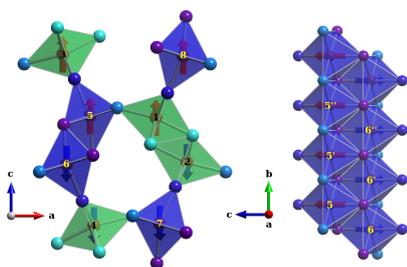


Рис. 1. Фрагмент кристаллической структуры NaV_2O_4 .

Недавно было синтезировано новое квазиодномерное соединение со смешанной валентностью ($d^{1.5}$) NaV_2O_4 [1], основным структурным мотивом в котором являются сдвоенные цепочки VO_6 октаэдров (Рис. 1). Монокристаллы NaV_2O_4 остаются металлами вплоть до температуры 40 мК, хотя при низких температурах наблюдается сильная анизотропия сопротивления ($\rho_{\perp}/\rho_{\parallel} > 20$). Магнитная восприимчивость NaV_2O_4 имеет пик при $T_N=140$ К, указывая на переход в антиферромагнитное (АФМ) состояние. С другой стороны, подгонка под закон Кюри-Вейсса даёт положительное значение постоянной Вейсса, указывая на ферромагнитный (ФМ) характер взаимодействий в системе. Экспериментаторами было сделано

предположение, что внутри зиг-заг цепочек взаимодействие ФМ, а между цепочками – АФМ. В ряде экспериментальных работ магнитная структура NaV_2O_4 была интерпретирована как несоразмерная волна спиновой плотности или геликоидальная магнитная структура. Целью данной работы является теоретическое исследование электронных и магнитных свойств NaV_2O_4 .

Нами впервые была построена реалистичная модель, описывающая низко энергетические состояния NaV_2O_4 . Все параметры модели были получены из первопринципных расчётов электронной структуры. Затем данная модель была решена в рамках метода Хартри-Фока. Рассчитанные интегралы перескока имеют существенно трёхмерный характер и не объясняют квази 1D поведения электрического сопротивления в NaV_2O_4 . Очень важным аспектом, который приводит к анизотропии электронных и магнитных свойств, является орбитальное упорядочение. Анизотропии, вызванной этим орбитальным порядком, уже достаточно, чтобы воспроизвести экспериментальное значение $\rho_{\perp}/\rho_{\parallel} > 20$. АФМ упорядочение спинов дополнительно усиливает анизотропию электрического сопротивления. Кроме того, АФМ упорядочение само вызвано орбитальным порядком, который усиливает ФМ характер взаимодействия в цепочках и ослабляет взаимодействие между цепочками. Немалая величина АФМ взаимодействия между вторыми ближайшими соседями может быть ответственна за формирование геликоидальной магнитной структуры. Однако в рамках приближения Хартри-Фока ФМ решение имеет немного меньшую энергию (на 9 мЭв на формульную единицу), чем АФМ решение. В нашей работе [2] приводятся качественные рассуждения о том, что учёт корреляций за пределами приближения Хартри-Фока должен привести к правильному АФМ основному состоянию.

1. Yamaura K., Arai M., Sato A. et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 196601 (2007)

2. Pchelkina Z.V., Solovyev I.V., Arita R., Phys. Rev. B **86**, 104409 (2012)

МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ И ФОТОГАЛЬВАНИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТЫ И МАГНИТНАЯ ДИНАМИКА В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ Gd_2CuO_4

Радзивончик Д.И.* , Меньшенин В.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: danilburg@mail.ru

Работа посвящена изучению магнитных свойств кристалла Gd_2CuO_4 , в частности, исследованию магнитоэлектрического (МЭ) и фотогальванического (ФГ) эффектов. Анализ рассматриваемых эффектов проводился на основе феноменологического подхода. Важной особенностью работы является применение теоретико-групповых методов, позволяющих проводить аналитические расчёты при описании системы.

Коллинеарная антиферромагнитная структура Gd_2CuO_4 характеризуется волновым вектором $\vec{k} = 0$. Поэтому можно ввести понятие чётных и нечётных элементов симметрии пространственной группы, учитывающих перестановки магнитных атомов в результате применения этих операций к системе. Используя свойства чётности или нечётности элементов для неприводимых представлений пространственной группы, были найдены базисные функции, выраженные через магнитные векторы.

Знание базисных функций позволило записать макроскопический термодинамический потенциал (энергию системы), с помощью которого анализировались динамические свойства системы, МЭ и ФГ эффекты. Установлено, что только в рамках четырёхподрешёточного потенциала удаётся согласовать теоретический расчёт и экспериментальные данные по МЭ эффекту [1]. На основании анализа этого эффекта было предложено основное ориентационное состояние магнитных моментов ионов гадолиния в условиях термодинамического равновесия. Были определены частоты антиферромагнитного резонанса и динамические восприимчивости, которые, как оказалось, могут зависеть от внешнего электрического поля.

В работе предположено существование фотогальванического тока в антиферромагнетике Gd_2CuO_4 , поскольку МЭ и ФГ эффекты тесно связаны [2]. Появление фототока объясняется зависимостью фотогальванического тензора от компонент векторов антиферромагнетизма, что позволяет записать инвариантное выражение для фототока относительно операции инверсии. Суть ФГ эффекта состоит в том, что при освещении монохроматическим светом антиферромагнитного кристалла, в котором после магнитного упорядочения центр инверсии становится центром антиинверсии, в системе появляется постоянный электрический ток. Направление этого тока определяется только симметрией системы при отсутствии внешнего постоянного электрического поля и пространственных неоднородностей. В работе определены направления плотности фототока, которые разрешены симметрией в данном магнитном состоянии, как для линейной, так и для циркулярной поляризации света. Поскольку эксперименты по обнаружению фотогальванического тока не ставились, то представленное изучение эффекта актуально.

1. Смирнов А.И., Хлюстикова И.Н., ЖЭТФ, **10**, 706 (1995)2. Меньшенин В.В., ФТТ, **54**, 1891 (2012)

МАГНИТНЫЕ СПЕКТРЫ АНСАМБЛЯ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ:
СРАВНЕНИЕ МЕТОДА НЕЗЕЛЬМАНА И ДУБОВИКАВласов В.С., Размыслов И.Н.*, Будина А.А., Турков В.К.

Сыктывкарский государственный университет, г. Сыктывкар, Россия

*E-mail: z-project@bk.ru

Нанокompозитные металл-диэлектрические плёнки являются перспективными материалами и обладают рядом уникальных свойств, такими как гигантское магнитосопротивление, выраженный магнитооптический отклик и др. [3]. Ферромагнитный резонанс (ФМР) является эффективным инструментом исследования плёнок и является чувствительным к структуре плёнок. Задачей работы была интерпретация экспериментальных спектров ФМР металлодиэлектрических композитных плёнок и подбор модели адекватно описывающей эксперимент по ФМР.

Металлодиэлектрические композитные плёнки состоят из множества случайным образом ориентированных магнитных и диэлектрических частиц, различающихся размерами и формой. Таким образом, каждая композитная плёнка представляет собой неоднородную и довольно сложную магнитную систему, поэтому ФМР в такой системе заметно отличается от резонанса в однородных монокристаллических плёнках. При наличии большого числа неоднородностей для гетерогенных структур была предложена модель среднего поля, которая лежит в основе моделей, использованных в работе.

Первая из использованных в работе моделей была предложена Незельманом. В этой модели магнитные частицы рассматриваются как эллипсоидальные, связанные между собой диполь-дипольным взаимодействием [1]. В работе Дубовика [2] было показано, что модель Незельмана должна быть подкорректирована для случая рассматриваемых плёнок для малых концентраций металла. Расхождение для энергии диполь-дипольного взаимодействия начинаются при объёмных концентрациях металла меньше 0,7 [2].

Используя модели Незельмана и Дубовика, исходя из уравнения Смита-Сула, получаем квадратное уравнение относительно резонансного поля, которое измеряется в эксперименте [1-2]. ФМР характеристики пленок были измерены экспериментально в лаборатории Сыктывкарского государственного университета [3]. Анализ экспериментальных данных по спектрам ФМР на основе полученного квадратного уравнения позволяет выявить структурные характеристики плёнок.

Для упрощения аналитических расчётов была написана программа в среде Scilab, с помощью которой были построены концентрационные зависимости резонансного поля. Было произведено сравнение теоретических и экспериментальных зависимостей резонансного поля [3]. В модели было учтено, что с ростом концентрации изменяются размеры частиц и их форма, следовательно, меняется тензор размагничивающих факторов. Таким образом, сравнивая теоретические и экспериментальные кривые, можно определить структурные параметры плёнки: распределение по направлениям частиц и форму магнитных частиц.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №12-02-01035а).

1. PlaceNameplaceNetzelmann PlaceTypeU., J. Appl. Phys., **68**, 1800 (1990)
2. Dubowik J., Phys. Rev., **54**, 1088 (1996)
3. Котов Л.Н., Турков В.К., Власов В.С., Голов А.В., Наноматериалы и наноструктуры. 21 век, **4**, 27 (2011)

ОСОБЕННОСТИ РОСТА КРИСТАЛЛОВ ГАЛЛАТА ЛАНТАНА $\text{LaGa}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ МЕТОДОМ БЕСТИГЕЛЬНОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКИ С ОПТИЧЕСКИМ НАГРЕВОМ

Салосин М.А. *, Гильмутдинов И.Ф., Мухамедшин И.Р.

Институт физики, Казанский федеральный университет, Россия

*E-mail: salosinm@gmail.com

Несмотря на многочисленную экспериментальную базу природа явления колоссального магнетосопротивления в магниторазбавленных манганитах до сих пор остаётся не до конца ясной. Для более полного понимания данного эффекта проводятся исследования родственных соединений с подобной кристаллической структурой, таких как галлат лантана с малой примесью марганца.

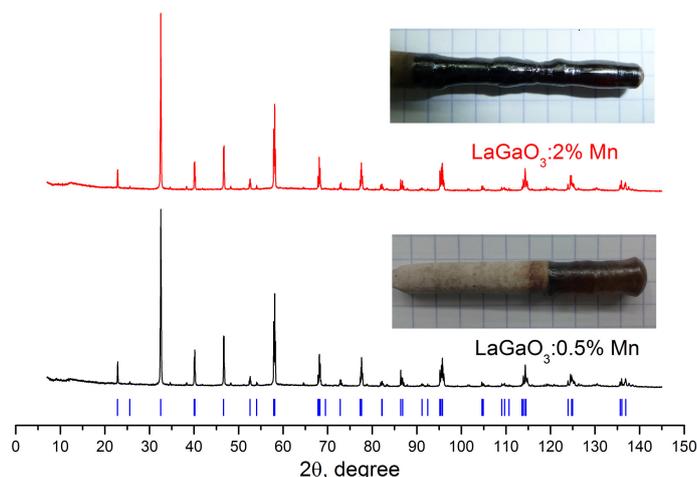


Рис. 1. Фотографии и дифрактограммы полученных кристаллов. Штрихами показаны теоретические положения рефлексов.

Целью нашей работы было выращивание монокристаллов галлата лантана с примесью марганца в процентном содержании 0.5 % и 2 % с помощью метода бестигельной зонной плавки с оптическим нагревом [1]. Согласно литературным данным, кристаллы указанного соединения ранее выращивались только методом Чохральского [2]. Нами была найдена оптимальная методика подготовки исходных компонентов и подобраны условия роста кристаллов $\text{LaGa}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ методом оптической зонной плавки. Часть выращенных кристаллов была размолота в порошок и исследована методом дифракции рентгеновских лучей на дифрактометре D2 Phaser фирмы Bruker.

Совпадение экспериментальных положений рефлексов с теоретическим (см. рис. 1), а также отсутствие дополнительных пиков говорит о получении ожидаемой кристаллической структуры и об отсутствии непрореагировавших исходных компонентов. Наличие пиков на больших углах показывает высокую кристалличность выращенных образцов. С увеличением количества марганца структура кристалла практически не поменялась.

Данные исследования выполнены при частичной поддержке гранта РФФИ № 10-02-01005-а.

1. C. Kooy, H.J.M. Couwenberg, Philips Techn. Rundschau **23**, 143 (1961/62)
2. N. Noginova, G.B. Loutts, and E.S. Gillman, V.A. Atsarkin, A.A. Verevkin., Phys. Rev. B, **63**, 174414 (2001)

МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ $n - \text{Ge} : \text{As}$ ВБЛИЗИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА
ИЗОЛЯТОР – МЕТАЛЛ ПО ДАННЫМ ЭПР И СКВИД МАГНИТОМЕТРИИ

Семенихин П.В.*, Вейнгер А.И., Тиснек Т.В., Макарова Т.Л., Голощاپов С.И.

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

*E-mail: petr3295@gmail.com

В области фазового перехода изолятор – металл (ИМ) происходит изменение как электрических, так и магнитных свойств полупроводника. В изоляторном состоянии полупроводник характеризуется парамагнетизмом Кюри, а в металлическом состоянии проявляется парамагнетизм Паули. Переход обычно возникает при увеличении концентрации примесных центров и сопровождается интересными, но слабо изученными явлениями спинного взаимодействия. В данной работе было проведено исследование влияния температуры, концентрации примеси и ее компенсации на магнитную восприимчивость $n - \text{Ge} : \text{As}$ в этой области концентраций примеси (порядка 10^{17} cm^{-3}) двумя методами: электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) [1] и СКВИД-магнитометрии (Superconducting Quantum Interference Device) [2]. Эти методики различаются физическими эффектами, лежащими в их основе. ЭПР методика использует эффект резонансного поглощения СВЧ энергии спинами в магнитном поле. Она обладает высокой относительной точностью и чувствительностью измерений, но не позволяет получить абсолютные значения примесной парамагнитной восприимчивости. В то же время СКВИД даёт абсолютные значения магнитной восприимчивости, но с учётом всех составляющих восприимчивости, а не только парамагнитной компоненты. Мы использовали обе эти методики для изучения магнитной восприимчивости в $n - \text{Ge} : \text{As}$ вблизи фазового перехода изолятор – металл. Переход ИМ в наших образцах был индуцирован изменением концентрации компенсирующей примеси Ga [3].

Оказалось, что величина магнитной восприимчивости χ и ее зависимость от температуры, концентрации примеси и компенсации заметно различается при использовании ЭПР- и СКВИД-методик. Сравнение температурных зависимостей χ , полученных этими методиками, показывает, что наиболее заметное различие проявляется при высоких температурах. СКВИД измерения указывают на рост χ , а ЭПР измерения – на ее падение. Это различие объясняется ростом концентрации неспаренных электронов в зоне проводимости, которые не проявляются в ЭПР. При понижении температуры плотность неспаренных спинов уменьшается за счёт возникновения антиферромагнитных спиновых пар. При этом χ почти не зависит от температуры. В области гелиевых и субгелиевых температур данные обеих методик хорошо согласуются и показывают рост χ , соответствующий переходу к ферромагнитному состоянию примесной подсистемы. Для хорошего согласования результатов необходимо учитывать магнитную восприимчивость решётки и других примесей и дефектов в СКВИД-измерениях.

Сопоставление данных для $n - \text{Ge} : \text{As}$, полученных с помощью обеих методик, позволило выявить три различных характера магнитных свойств: парамагнетизм при высокой температуре, антиферромагнетизм в области промежуточных температур и ферромагнетизм при низких температурах.

1. Людвиг Д., Вудбери Г., Электронный резонанс в полупроводниках, Москва (1964)
2. Корнев В.К., СОЖ, 7, 83 (2001)
3. Вейнгер А.И., Забродский А.Г., Тиснек Т.В., Голощاپов С.И., ФТП 42, 1301 (2008)

ПРОСТРАНСТВЕННО-МОДУЛИРОВАННЫЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ В МУЛЬТИФЕРРОИКЕ ТИПА BiFeO_3 ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Соловьёв С.В.^{1*}, Попков А.Ф.¹, Звездин А.К.², Гареева З.В.³, Кулагин Н.Е.⁴

¹Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, г. Зеленоград, Россия

²Институт общей физики РАН им. А.М. Прохорова, Москва, Россия

³Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, г. Уфа, Россия

⁴Государственный университет управления, Москва, Россия

*E-mail: sv.soloviov@yandex.ru

Ромбоэдрические антиферромагнетики типа BiFeO_3 [1], кристаллическая структура которых описывается пространственной группой симметрии $R3c$, интересны как с точки зрения изучения пространственно неоднородных магнитоэлектрических взаимодействий вплоть до комнатной температуры, так и для практических приложений. Дополнительный интерес к этому типу материалов вызван присутствием в них пространственно-модулированных спиновых структур, которые приводят к особенностям проявления магнитоэлектрических эффектов в монокристаллах и плёнках BiFeO_3 при изменении температуры и магнитного поля.

В работе проводился качественный и численный анализ пространственно неоднородных антиферромагнитных состояний мультиферроика, который представляет собой ромбоэдрический антиферромагнетик типа BiFeO_3 с пространственной группой симметрии $R3c$, обладающий флексомагнитоэлектрическим взаимодействием. Плотность свободной энергии мультиферроика включает в себя неоднородное обменное изотропное и магнитоэлектрическое взаимодействие, магнитоупругую энергию, а также вклад взаимодействия магнитной структуры с внешним магнитным полем и взаимодействие Дзялошинского. Рассмотрение проводилось на основе полученных ранее уравнений динамики антиферромагнитного момента в приближении предельно малого слома подрешёток [2].

Качественный анализ и численные расчёты периодических антиферромагнитных состояний показали, что между пространственно неоднородными состояниями мультиферроика, к которым относятся циклоидальные и конусообразные периодические структуры, возможны фазовые переходы первого и второго рода. Наличие взаимодействия Дзялошинского приводит к особенностям поведения этих состояний во внешнем магнитном поле таким, как искажение циклоидальной антиферромагнитной структуры и гистерезисные зависимости между конусообразными структурами. Получены критические значения энергии наведённой магнитоупругими деформациями одноосной анизотропии и критические линии фазовых переходов для различных направлений магнитного поля, определяющие состояние мультиферроика на плоскости варьируемых параметров: энергия анизотропии – внешнее магнитное поле.

Полученные результаты могут служить основой для объяснения особенностей наблюдения поляризации, наблюдавшиеся в сильных магнитных полях при варьировании температуры в BiFeO_3 [3].

1. Кадомцева А.М., Звездин А.К., Попов Ю.Ф. и др., Письма в ЖЭТФ, **79**,705 (2004)

2. Попков А.Ф., Соловьёв С.В., Кулагин Н.Е., Звездин А.К., Известия вузов. Электроника, **94**, 3 (2012)

3. Masashi Tokunaga, Masaki Azuma, Yuichi Shimakawa, Journal of the Physical Society of Japan, **79**, 064713 (2010)

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ НА ТИП МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В LaMn_2Si_2

Соснин Р.И.^{1*}, Шориков А.О.², Потеряев А.И.², Анисимов В.И.²

¹⁾Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

²⁾Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: merk-dos1@rambler.ru

В данной работе было исследовано влияние структурных изменений на тип магнитного упорядочения в соединении LaMn_2Si_2 , для чего были проведены расчёты ферромагнитных и антиферромагнитных конфигураций для кристаллических структур, наблюдаемых при температурах 305 К и 10 К. В результате расчёта для структуры, измеренной при температуре 10 К, было получено ферромагнитное основное состояние, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Для кристаллической структуры, существующей при температуре 305 К, рассчитанное основное состояние является также ферромагнитным, что противоречит экспериментальным данным и указывает или на недостаточность выбранной модели для описания данного соединения при комнатных температурах, или на недостаточный размер элементарной ячейки. Локальный магнитный момент марганца, полученный для структуры, существующей при 305 К, согласуется с экспериментальными данными, а для структуры, измеренной при 10 К, находится в области между моментами, полученными при LSDA [1] и LDA+U [2] расчётах. Неточности в определении магнитного момента марганца могут быть объяснены недостаточным размером выбранной сверхъядерки, а также тем, что в ходе расчёта магнитный момент учитывался только на d -оболочке марганца, а его остальные оболочки и соседние атомы лантана и кремния рассматривались как немагнитные. В дальнейшем планируется провести расчёты для укрупнённой ячейки с целью уточнения величин магнитных моментов и типа магнитного упорядочения для структуры, существующей при температуре 305 К.

	T=305 К	T=10 К
Магнитный момент, μ_B		
LSDA AFM	1.66	1.59
LSDA FM	1.76	1.73
LDA+U AFM	3.91	3.88
LDA+U FM	3.97	3.94
Экспериментальный магнитный момент [3], μ_B	1.22	2.61
Полная энергия, Ry		
LSDA AFM	-44521.942	-45521.941
LSDA FM	-45521.964	-45421.963
LDA+U AFM	-45520.986	-45420.956
LDA+U FM	-45520.006	-45420.974

1. Sham L.J. ad Kohn W., Phys. Rev., **145**, 561 (1966)
2. Anisimov V.I., Solovyev I.V., Korotin M.A., Czyzyk M.T. and Sawatzky G.A., Phys. Rev., **48**, 16929 (1993)
3. Hoffman M. Campbell S.J. Zhao X.L. Li H.S, Cywinski R., Materials Science Forum Vols., 587 (1996)

АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ НАМАГНИЧИВАНИЯ МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ В СЛАБЫХ ПОЛЯХ

Танцюра А.О.

ФГБОУ ВПО «Юго-Западный государственный университет», г. Курск, Россия

E-mail: Tancyra@mail.ru

Акустогранулометрическая методика исследования магнитной жидкости (МЖ) позволяет получить данные о физических параметрах диспергированных в жидкости-носителе магнитных наночастиц и, кроме того, провести анализ физических процессов, проходящих в МЖ при намагничивании в условиях адиабатной звуковой волны. Акустомагнитный эффект (АМЭ), наблюдаемый в намагниченных МЖ при распространении в них акустической волны, теоретически описывается концентрационной моделью [1]. Настоящая работа своими целями ставит теоретический и экспериментальный анализ процесса намагничивания МЖ в слабых полях, где являются линейными полевые зависимости величин относительной намагниченности и амплитуды ЭДС, индуцируемой за счёт АМЭ, и проведение исследований на новом, более концентрированном образце с целью подтверждения физической обоснованности модельной теории.

Исследуемый в настоящей работе образец MF-3 представляет собой магнитный коллоид типа магнетит в керосине с концентрацией магнитной фазы 25,6 %.

Проанализируем начальные участки кривой намагничивания – $\beta_M(H)$ и полевой зависимости относительной амплитуды ЭДС, индуцируемой за счёт АМЭ – $\beta(H)$. С учётом линейности указанных зависимостей в области слабых магнитных полей, когда $H \rightarrow 0$, частное β_M/β имеет вид

$$\frac{\beta_M}{\beta} = \frac{1 + k''/3}{1 - k'} = \frac{\operatorname{tg}\beta_M}{\operatorname{tg}\beta}, \quad (1)$$

где $\operatorname{tg}\beta$ и $\operatorname{tg}\beta_M$ – угловые коэффициенты начальных (прямолинейных) участков зависимостей $\beta(H)$ и $\beta_M(H)$, $k' = qc^2/C_p$, $k'' = N_d\mu_0 M_S m_*/(k_0 T)$. Из формулы (1) следует, что величина магнитного момента частицы может быть вычислена по формуле

$$m_* = \frac{3k_0 T \left[\frac{\operatorname{tg}\beta_M}{\operatorname{tg}\beta} \cdot (1 - k') - 1 \right]}{N_d \mu_0 M_S}.$$

В первую очередь, данные, полученные по приведённой методике, характеризуют параметры наиболее «крупных» магнитных наночастиц, которые первыми ориентируются в магнитном поле (в области слабых магнитных полей).

По экспериментальным данным установлено, что размер крупной частицы, вычисляемый на основе акустогранулометрии, больше, чем определяемый по кривой намагничивания. Таким образом, можем сделать вывод, что акустическая методика позволяет получить большую по сравнению с магнитогранулометрией ширину распределения наночастиц магнитного коллоида по размерам.

Сделаем вывод, что с ростом концентрации МЖ расчётные диаметры «крупных» частиц увеличиваются, хотя дисперсный состав МЖ при увеличении концентрации не изменился. В таком случае этот факт можно объяснить лишь усилением магнитного диполь-дипольного взаимодействия частиц, которые находятся друг от друга на расстояниях тем меньших, чем выше концентрация МЖ.

1. Полуниин В.М. Акустические свойства нанодисперсных магнитных жидкостей – М.: Физматлит, 384 (2012)

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ОБМЕННОГО СМЕЩЕНИЯ В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА NiMnGa

Тараненко И.А.*, Бучельников В.Д., Соколовский В.В., Таскаев С.В.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

*E-mail: ivan.taranenko@gmail.com

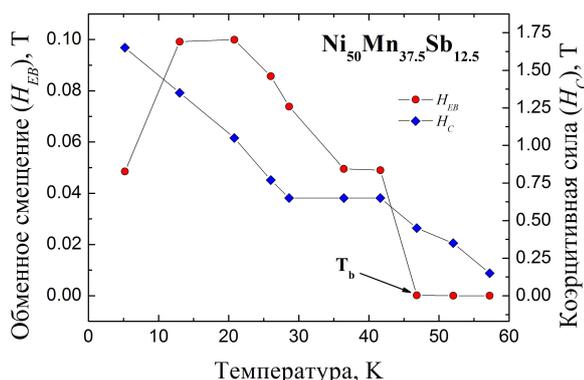


Рис. 1. Теоретическая температурная зависимость поля обменного смещения и коэрцитивной силы для сплава $Ni_{50}Mn_{37.5}Sb_{12.5}$.

Сплавы Гейслера – это тройные интерметаллидные соединения со стехиометрической структурой X_2YZ , где X, Y – это элементы *sp*-группы таблицы Менделеева, а Z – переходный элемент. Примером такого сплава может служить Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb) [1].

Хорошо известно, что в стехиометрическом $Ni_{50}Mn_{25}X_{25}$ сплаве все атомы Mn1 находятся на своих местах и взаимодействуют ФМ. Однако, прошлые эксперименты с нестехиометрическими сплавами $Ni_{50}Mn_{25+x}X_{25-x}$ показали, что в мартенситной фазе избыточные Mn2 атомы оккупируют места атомов X и взаимодействуют с атомами Mn1 АФМ [2, 3, 7]. Таким образом, мартенситное состояние сплава $Ni_{50}Mn_{25+x}X_{25-x}$ сопровож-

дается ФМ и АФМ взаимодействием атомов. Следует отметить, что АФМ взаимодействие в мартенситной фазе является причиной существования эффекта обменного смещения.

В нашей модели используется простая трёхмерная кубическая решётка с периодическими граничными условиями и учётом взаимодействия атомов в двух координационных сферах. Так как магнитный момент атомов Ni ($\approx 0.3\mu_B$) мал по сравнению с магнитным моментом атомов Mn ($\approx 4.0\mu_B$), и так как атомы Sb не являются магнитными атомами, мы пренебрегаем взаимодействием атомов Ni и Mn. Концентрация атомов Ni является постоянной в рассматриваемом сплаве $Ni_{50}Mn_{25+x}Sb_{25-x}$, мы не принимаем к рассмотрению атомы Ni. В случае стехиометрического сплава $Ni_{50}Mn_{25}Sb_{25}$ концентрация атомов Mn1 и Sb равна 50%. А для случая не стехиометрического распределения атомов $Ni_{50}Mn_{25+x}Sb_{25-x}$ избыточные Mn2 атомы занимают места атомов Sb. Таким образом, в данной модели мы рассматриваем ФМ и АФМ взаимодействие спинов, используя модель Гейзенберга.

В результате моделирования было получено, что обменное смещение зависит от концентрации АФМ атомов, температуры и числа моделируемых петель гистерезиса. Также для сплава $Ni_{50}Mn_{37.5}Sb_{12.5}$ была получена температура блокировки (рис. 1). Полученные результаты близки к теоретическим значениям [5, 6].

1. Entel P, Buchelnikov V. D. et al., Mater. Sci. Forum, **21**, 583 (2008)
2. Kainuma R. et al., Appl. Phys. Lett., **88**, 195513 (2006)
3. Sutou Y. et al, Appl. Phys. Lett., **85**, 4358 (2004)
4. Krenke T. et al., Nature Mater, **4**, 450 (2005)
5. Khan M. et al., Appl. Phys. Lett., **91**, 072510 (2007)
6. Khan M. et al., J.Phys.: Condensed Matter, **20**, 235204 (2008)
7. Planes A. et al., J.Phys.: Condensed Matter, **21**, 233201 (2009)

ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ–ДИЭЛЕКТРИК В МОДЕЛИ ХАББАРДА ПРИ УЧЁТЕ
НЕСОИЗМЕРИМЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУРТимиргазин М.А.^{1*}, Аржников А.К.¹, Ирхин В.Ю.²¹Физико–Технический Институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: timirgazin@gmail.com

Переход металл–диэлектрик (ПМД) является одним из наиболее интересных, хотя и недостаточно изученных типов фазовых переходов [1]. Обычно такие переходы рассматриваются в контексте сильных электронных корреляций. Если для спектра выполняется условие нестинга, диэлектрическая щель возникает при сколь угодно малых значениях межэлектронного взаимодействия. При нарушении условия нестинга (например, при учёте перескока электронов между следующими за ближайшими соседями) ПМД происходит при конечном взаимодействии. Как было показано в работе [2], для соответствующего ПМД в модели Хаббарда важно антиферромагнитное упорядочение, причём он является переходом первого рода. (Ранее последний вывод был сделан для случая дальнедействующего кулоновского взаимодействия.)

Мы рассмотрели ПМД в рамках приближения Хартри–Фока модели Хаббарда с перескоком между ближайшими и следующими за ближайшими соседями. Особенностью наших расчётов был учёт несоизмеримых магнитных состояний, а именно спиральной спиновой (СС) структуры.

Численные расчёты, проведённые для двумерных и трёхмерных решёток, показывают существенную разницу между этими двумя случаями. Для квадратной решётки было обнаружено, что при половинном заполнении ПМД первого рода в точности совпадает с магнитным переходом из СС состояния в антиферромагнитное. Для трёхмерных решёток такого совпадения найдено не было — при увеличении U сначала происходит переход из металлической спиральной фазы в металлическую антиферромагнитную, а затем — из антиферромагнитной металлической фазы в антиферромагнитную диэлектрическую (похожий сценарий, включающий, однако, металлическую парамагнитную фазу, обсуждался в [2]).

Результат, полученный для двумерного случая, по нашим сведениям является первым примером ПМД между двумя магнитоупорядоченными состояниями. Ранее считалось, что критическая размерность, начиная с которой становится возможным такой переход, находится в диапазоне от 2 до 3. Таким образом, наши исследования опускают это значение ниже 2.

Работа частично поддержана проектами РФФИ (№ 12-02-31510) и Президиума УрО РАН (№ М-9).

1. Мотт Н.Ф. Переходы металл–изолятор. М.: Наука, (1979)

2. Katsnelson M.I., Irkhin V.Yu. J.Phys. C17, 4291 (1984)

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЁНОК $Mg(Fe_{0.8}Ga_{0.2})_2O_{4+\delta}$
НА ПОДЛОЖКАХ КРЕМНИЯ

Труханов А.В.^{1*}, Стогний А.И.¹, Новицкий Н.Н.¹, Труханов С.В.¹, Васильев А.Н.²,
Кецко В.А.³, Гераськин А.А.³

¹ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск

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

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

*E-mail: truhanov86@mail.ru

В результате процессов получения плёнок методом ионно-лучевого распыления керамической мишени $Mg(Fe_{0.8}Ga_{0.2})_2O_{4+\delta}$ ионами кислорода в вакууме на кремнии были контролируемо сформированы структуры, где толщина плёнок составляла ~ 200 и ~ 400 нм. Были исследованы полевые зависимости намагниченности в зависимости от условий постсинтезного отжига (в интервале $800-1000$ °С) и от толщины плёнок.

Плёнка, отожжённая при 800°C (толщина 200 нм), характеризуется слабым магнитным сигналом и минимальным значением удельной намагниченности ($M = 1.4 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{кг}^{-1}$ при 4.2 K и $0.7 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{кг}^{-1}$ при 300 K). Коэрцитивная сила данного образца составляет $H_c \sim 40$ Э. Небольшие значения намагниченности можно объяснить отсутствием кристаллической структуры и, как следствие, несформированным дальним магнитным порядком [2]. С ростом температуры отжига (до 900°C) значения коэрцитивной силы ($H_c \sim 210$ Э) и удельной намагниченности ($\sim 6.8 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{кг}^{-1}$ при 4.2 K и $\sim 4.5 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{кг}^{-1}$ при 300 K) плёнок увеличивались. Кривая удельной намагниченности выходит в насыщение как при низких температурах (4.2 K), так и при комнатной температуре (300 K). Кривая M плёнки, отожжённой при 1000°C , при комнатной температуре не выходит в насыщение в полях до 3 Тл ($M \sim 1.5 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{кг}^{-1}$), а при 4.2 K выходит в насыщение и $M \sim 2.8 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{кг}^{-1}$. Коэрцитивная сила увеличивается практически в 5 раз ($H_c \sim 1050$ Э). Данные факты могут указывать на неоднородное ферримагнитное состояние, которое может являться следствием как увеличения степени неоднородности распределения катионов, так и образованием сторонних фаз на интерфейсе плёнка-подложка в процессе термообработки плёнок. Значение удельной намагниченности плёночного образца, отожжённого при 900°C при комнатной температуре, составляет $\sim 16\%$ от значения M керамического образца в аналогичных температурных условиях. Предположение об увеличении значений удельной намагниченности плёнок с ростом их толщины подтверждаются данными вибрационной магнитометрии. Величина M плёнки $Mg(Fe_{0.8}Ga_{0.2})_2O_{4-\delta}$ толщиной ~ 400 нм, отожжённой при температуре 900°C , составляет порядка 52% от значения удельной намагниченности насыщения керамического аналога. При комнатной температуре значение удельной намагниченности составляет $14.6 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{кг}^{-1}$, а при температуре 4.2 K – $17.7 \text{ A}\cdot\text{m}^2\cdot\text{кг}^{-1}$. Кривая намагниченности, как и в случае с керамическим аналогом, имеет прямоугольный вид. Увеличение значения удельной намагниченности плёнок $Mg(Fe_{0.8}Ga_{0.2})_2O_{4-\delta}$ толщиной ~ 400 нм относительно плёнок толщиной ~ 200 нм является результатом двух факторов: 1) снижение доли толщины переходного слоя на интерфейсе плёнка-подложка относительно всей толщины плёнки; 2) усиление дальнего порядка обменных взаимодействий (за счёт увеличения размера кристаллитов) [3].

1. Труханов А.В., Стогний А.И. и др., Неорг. Мат. **47(9)**, 1128 (2011)

2. Труханов С.В., ФТГ, **53**, 1748 (2011)

3. Труханов С.В., Труханов А.В., Васильев А.Н., и др. ЖЭТФ. **140**, 942 (2011)

ДИСПЕРСИОННОЕ СООТНОШЕНИЕ ДЛЯ УПРУГИХ ВОЛН В ДВУХСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ ФЕРРИТ-ПЬЕЗОЭЛЕКТРИК

Галичян Т.А., Фирсова Т.О.*

Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого,

г. В. Новгород, Россия

*E-mail: firsovati@mail.ru

Соединения ферритовых и пьезоэлектрических структур представляют особый интерес, т.к. в них в результате механического взаимодействия магнитоэлектрической и пьезоэлектрических компонент возможны эффекты, которые по отдельности отсутствуют в каждой из них. Одним из таких эффектов является магнитоэлектрический (МЭ) эффект, который заключается в возникновении поляризации под действием магнитного поля. МЭ эффект в композитах обусловлен механическим взаимодействием магнитоэлектрической и пьезоэлектрической фаз и напрямую связан с распространением упругих колебаний, следовательно, частотная зависимость эффекта определяется дисперсионным соотношением для данного типа волн.

Распространение упругих волн в двухслойной среде существенно отличается от распространения в однородной среде. В данной работе для модели путём совместного решения уравнений эласто- и электродинамики получено выражение для магнитоэлектрического коэффициента по напряжению через параметры, характеризующие ферритовую и пьезоэлектрическую плёнки.

Рассмотрено распространение упругих волн в двухслойной феррит-пьезоэлектрической структуре с учётом того, что амплитуда планарных колебаний изменяется по толщине образца и является неоднородной в направлении, перпендикулярном границе раздела. Получено дисперсионное соотношение (1) для волн акустического диапазона, из которого, в общем случае, следует нелинейная связь между круговой частотой и волновым вектором.

$$\omega = \sqrt{\frac{Y_m t_m + Y_p t_p}{\rho_m t_m + \rho_p t_p}} \cdot k \quad (1)$$

где Y_m – модуль сдвига феррита, Y_p – модуль сдвига пьезоэлектрика, t_m – толщина феррита, t_p – толщина пьезоэлектрика, ρ_m – плотность феррита, ρ_p – плотность пьезоэлектрика, k – волновой вектор

В случае малых толщин это соотношение переходит в линейное соотношение между круговой частотой и волновым вектором, при этом скорость распространения упругих волн меньше, чем скорость распространения упругих волн в феррите, но больше, чем в пьезоэлектрике. Для предельного перехода показано, что в случае, когда один из слоёв значительно тоньше другого, дисперсионное соотношение переходит в дисперсионное соотношение для феррита или пьезоэлектрика соответственно.

1. Филиппов Д.А., ФТТ, **54**, 1112, (2012)

МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНАЯ АНИЗОТРОПИЯ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЁНОК НА ОСНОВЕ Fe

Харин Е.В.*, Шефтель Е.Н.

Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва, Россия

*E-mail: harin-eugene@ya.ru

В работе представлены результаты исследования нанокристаллических плёнок Ni, Fe, Fe₉₀N₁₀, Fe₉₅Zr₅ и Fe₈₅Zr₅N₁₀, полученных магнетронным распылением. Структура плёнок изучена методом рентгеновской дифракции на дифрактометре ДРОН-3 с излучением Cu K α . Дифрактограммы анализировали с использованием специального пакета компьютерных программ [1]. Размер зерна $2R_c$ и микродеформацию ϵ присутствующих фаз оценивали по физическому уширению рентгеновских линий.

Образец	Фазовый состав, об.%	Период решётки, Å	Размер зерна $2R_c$, нм	Микродеформация ϵ , %
Ni	ГЦК-Ni	3,5163±0,0002	10±1	0,05±0,05
Fe	ОЦК-Fe	2,824±0,003	39±11	0,56±0,04
Fe ₉₀ N ₁₀	ОЦК-Fe(N) ~ 95	2,873	15	0,53
	Fe ₂ N ~ 5	$a = 2,759; c = 4,429$	78	0,07
Fe ₉₅ Zr ₅	ОЦК-Fe(Zr)	$a = 2,857 \pm 0,008$	34±3	0,23±0,02
Fe ₈₅ Zr ₅ N ₁₀	ОЦК-Fe(N, Zr) ~ 93	$a = 2,899 \pm 0,007$	11±1	0,24±0,09
	Fe ₂ N ~ 7	$a = 2,738; c = 4,560$	35	1,05

Статические магнитные свойства (намагниченность насыщения M_S , коэрцитивная сила H_C и относительная остаточная намагниченность M_R/M_S) измерены на вибрационном магнитометре в полях до 10 кЭ. Локальная и макроскопическая магнитные структуры оценены методом корреляционной магнитометрии [2]. Полевая зависимость магнитострикции плёнок в полях до 80 Э измерена консольным методом на атомно-силовом микроскопе [3]. Все использованные в работе измерения выполнены при комнатной температуре.

Методом корреляционной магнитометрии измерены величины эффективного локального (на масштабе зерна $2R_c$) поля анизотропии H_a и радиус стохастического домена R_L . Магнитострикция насыщения λ_S оценена из описания полевых зависимостей магнитострикции законом приближения к насыщению [4]. Полученные величины H_S и H_a рассмотрены в докладе как результат взаимодействия магнитокристаллической, магнитоупругой и магнито-статической энергий на различных масштабах.

Образец	M_S , Гс	H_C , Э	M_R/M_S	H_a , Э	R_L , нм	λ_S , 10 ⁻⁶
Ni	472±5	140	0,38	1600±100	9±3	-14±2
Fe	1683±8	12,8	0,75	1200±400	580±160	17±3
Fe ₉₀ N ₁₀	1332±20	89	0,75	1800±400	80±10	-8±2
Fe ₉₅ Zr ₅	1598±9	45	0,34	800±100	31±6	7,5±0,5
Fe ₈₅ Zr ₅ N ₁₀	1310±7	40	0,37	1600±100	20±2	21±2

1. Шелехов Е.В., Свиридова Т.А., МиТОМ, 2000, **8**, 16 (2000)
2. Iskhakov R.S., Komogortsev S.V., Physics of Metals and Metallography, **112**, 666 (2011)
3. Sheftel' E.N., Harin E.V., Komogortsev S.V., Russian Metallurgy (Metally), **9**, 875 (2011)
4. Celasco M., Il Nuovo Cimento, **9B**, 425 (1972)

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХРЕШЁТОК $[\text{Co}/\text{Cu}]_n$ МЕТОДОМ ЯМР

Чупраков С.А., Блинов И.В., Оглобличев В.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: st.krezz@gmail.com

В работе исследовано влияние количества пар бислоёв $[\text{Co}_{15}/\text{Cu}_9]_n$ на величину магнорезистивного эффекта. Целью работы является выявление причины снижения величины магнорезистивного эффекта с ростом числа пар бислоёв $[\text{Co}_{15}/\text{Cu}_9]_n$.

Сверхрешётки $\text{SiO}_2/\text{Fe}_{50}/[\text{Co}_{15}/\text{Cu}_9]_n/\text{Cr}_{30}$ были приготовлены методом магнетронного напыления на постоянном токе с помощью напылительной системы MPS-4000-C6 (Ulvac). Образец представляет собой подложку – SiO_2 , на которую был напылён буферный слой Fe толщиной 50 Å. Толщины слоёв Co и Cu составляют 15 Å и 9 Å, соответственно. Число бислоёв Co/Cu варьировалось от 10 до 40 с шагом в 10 пар. Защитный слой Cr имеет толщину 30 Å.

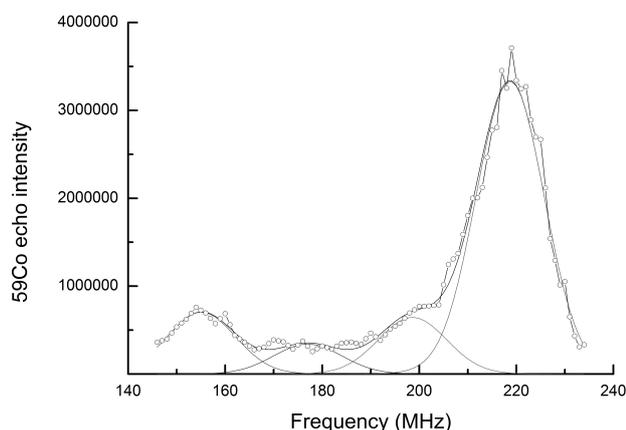


Рис. 1. ^{59}Co ЯМР-спектр с разложением для сверхрешётки $\text{SiO}_2/\text{Fe}_{50}/[\text{Co}/\text{Cu}]_{10}/\text{Cr}_{30}$.

Очевидно, что непосредственный интерес представляет величина гигантского магнитосопротивления. В ходе изучения магнорезистивных характеристик было установлено, что увеличение числа бислоёв приводит к снижению величины эффекта ГМС: 10(38%), 20(31%), 30(31%), 40(24%). Для выявления причин снижения величины эффекта ГМС с ростом числа бислоёв было решено использовать метод ядерного магнитного резонанса.

Для достижения поставленной цели была разработана методика выполнения эксперимента, а также методика обработки полученных экспериментальных данных.

Проведённые исследования позволили выявить корреляцию между величиной магнорезистивного эффекта и площадью пика, характеризующего степень идеальности межслойных границ в исследуемом образце.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 12-П-2-1051), Президиума РАН (проект по программе Президиума РАН «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов») и частичной поддержке Проекта молодых учёных и аспирантов УрО РАН 2012 г.

ВЛИЯНИЕ АМОРФИЗАЦИИ НА МАГНИТНОЕ СОСТОЯНИЕ И МАГНИТОТЕПЛОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СПЛАВА Gd_3Ni

Шишкин Д.А.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: shishkin@imp.uran.ru

Аморфные сплавы с редкоземельными элементами привлекательны с точки зрения использования их в качестве рабочего тела магнитных рефрижераторов. Помимо этого, исследование аморфных интерметаллических сплавов редкоземельных элементов с $3d$ переходными металлами вносит вклад в развитие существующих представлений о магнитных взаимодействиях между $3d$ и $4f$ ионами и роли переходного металла в формировании свойств сплавов. В литературе практически отсутствуют данные относительно магнитного состояния аморфного сплава Gd_3Ni , изучение магнитных свойств аморфных сплавов Gd-Ni ограничивается более низким содержанием гадолиния [1,2]. Поэтому целью работы являлось исследование влияния аморфизации, проводимой разными методами, на магнитные и магнитотепловые свойства Gd_3Ni .

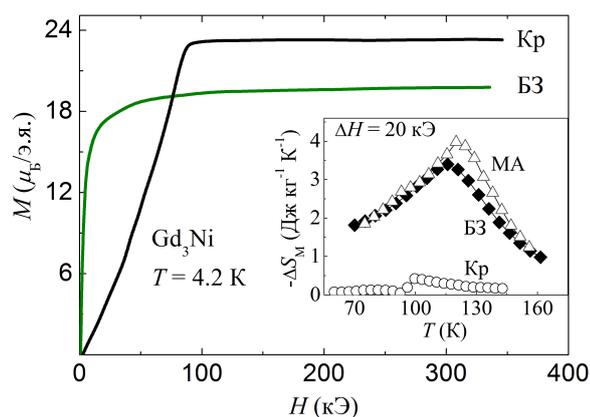


Рис. 1. Намагниченность Gd_3Ni в импульсных магнитных полях при $T = 4.2$ К. На вставке: $-\Delta S_M(T)$ при $\Delta H = 20$ кЭ.

Аморфные сплавы были приготовлены методами закалки на быстро вращающийся барабан и механоактивации. Дифрактограммы полученных образцов свидетельствуют об аморфном состоянии сплавов Gd_3Ni . Измерения намагниченности в квазистационарных и импульсных полях показали кардинальное изменение магнитного состояния после аморфизации Gd_3Ni . Если кристаллический Gd_3Ni (Кр) является антиферромагнетиком ниже температуры Нееля $T_N = 100$ К с критическим полем $H_C \approx 40$ кЭ [3], то его аморфизация приводит к ферромагнитному состоянию с температурами Кюри $T_C = 118$ и 123 К для быстрозакаленного (БЗ) и механоактивированного (МА) сплавов, соответственно. Данные высокополевой намагниченности дают возможность предполагать наличие магнитного момента на атомах никеля до $1.2 \mu_B$. Магнитокалорический эффект также претерпевает значительные изменения после аморфизации. Изотермическое изменение магнитной энтропии ΔS_M , вычисленное используя соотношения Максвелла, показало более чем 8-кратное увеличение в малых магнитных полях по сравнению с кристаллическим Gd_3Ni .

Работа поддержана программой Президиума РАН (проект № 12-П-23-2005) и Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 10-02-96028).

1. Buschow K.H.J., J. Magn. Magn. Mater., **21**, 97 (1980)
2. Zhong X.C., Tang P.F, Liu Z.W. et al., J. Alloys Comp., **509**, 6889 (2011)
3. Tristan N.V., Nikitin S.A., Palewski T. et al., J. Alloys Comp., **334**, 40 (2002)

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НА ЭЛЕКТРОННУЮ И МАГНИТНУЮ КОНФИГУРАЦИИ f -ОБОЛОЧКИ В СЛОИСТОМ СОЕДИНЕНИИ $\text{Pu}_2\text{Co}_3\text{Si}_5$

Шориков А.О.^{1,2*}, Лукоянов А.В.^{1,2}, Анисимов В.И.^{1,2}, Дремов В.В.³

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

³Российский федеральный ядерный центр – ВНИИ технической физики
им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Россия

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

На протяжении последних десяти лет слоистые соединения на основе плутония исследуются особенно активно в связи с обнаружением необычной сверхпроводимости в соединениях [1] PuMGa_5 для $M = \text{Co}, \text{Rh}$, а также Fe и Ni под давлением, – серия соединений 115. Недавно был синтезирован новый класс слоистых соединений $\text{Pu}_2\text{M}_3\text{Si}_5$ с $M = \text{Co}$ и Ni [2]. В соединении $\text{Pu}_2\text{Co}_3\text{Si}_5$ (пространственная группа $C2/c$) при низких температурах происходит два магнитных перехода, о чем свидетельствует температурная зависимость магнитной восприимчивости [2]. Кроме того, экспериментальные зависимости электросопротивления и электронного коэффициента удельной теплоёмкости характеризуются участками с квадратичной зависимостью от температуры, которые свидетельствуют о сильных электронных корреляциях, характеризующихся высокими значениями коэффициента Зоммерфельда порядка 100 мДж/моль- Pu-K [2].

Для исследования электронной структуры соединения $\text{Pu}_2\text{Co}_3\text{Si}_5$ в данной работе были проведены расчёты при помощи метода $\text{LDA}+\text{U}+\text{SO}$ [3] для экспериментальных параметров кристаллической структуры. Учёт сильных электронных корреляций проводился для электронов $5f$ оболочки плутония (параметры прямого кулоновского $U = 4$ эВ и обменного хундовского $J_H = 0,48$ эВ взаимодействий [3]) и $3d$ оболочки Co ($U = 8$ эВ и $J_H = 0,90$ эВ, которые также были вычислены при помощи процедуры сверхъядерки в приближении LDA [4]). Основной вклад в плотность электронных состояний вносят состояния Pu , образующие широкие зоны. Состояния кобальта лежат ниже по энергии (-7 ; -4) эВ и практически не перемещаются с состояниями плутония.

Магнитное состояние в $\text{Pu}_2\text{Co}_3\text{Si}_5$ характеризуется $S = 1,1$, $L = 1,3$, $J = 0,2$ и небольшим эффективным магнитным моментом порядка $0,3\mu_B$. Таким образом, электронная конфигурация плутония в $\text{Pu}_2\text{Co}_3\text{Si}_5$ близка к f^6 , так же как и в PuCoGa_5 [3], и сопровождается реализацией существенно промежуточного типа связи с небольшим преобладанием jj -типа.

Показано, что в $\text{Pu}_2\text{Co}_3\text{Si}_5$ ионы плутония находятся в электронной конфигурации близкой к f^6 , и низкосимметричная кристаллическая структура приводит к промежуточному типу связи в $5f$ оболочке ионов плутония. В дальнейшем полученные результаты будут расширены за счёт рассмотрения различных магнитных конфигураций, возникающих при низких температурах.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта 11-2-04-ЯЦ УрО РАН и гранта Министерства образования и науки.

1. Sarrao J.L., et al., Nature, 420, **297** (2002)
2. Bauer E.D., et al., J. Phys.: Condens. Matter, 23, **094223** (2011)
3. Shorikov A.O., Lukoyanov A.V., Korotin M.A., and Anisimov V.I., Phys. Rev. B, 72, **024458** (2005)
4. Anisimov V.I. and Gunnarsson O., Phys. Rev. B, 43, **7570** (1991)

Фазовые переходы и критические

явления

ЯВЛЕНИЯ

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ

~ o ~

Плѐночная конденсация в плоскощелевом конденсаторе контурной тепловой трубы

Бартули Э.Ф.

Учреждение Российской академии наук Институт теплофизики УрО РАН,
г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ebartuli@gmail.com

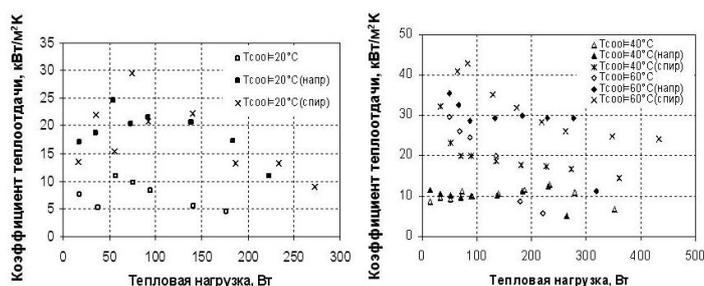


Рис. 1. Зависимость коэффициентов теплоотдачи при конденсации от тепловой нагрузки.

Теплообменные и гидродинамические процессы в контурных тепловых трубах (КТТ), сопровождаемые фазовыми переходами теплоносителя, имеют весьма сложный характер. Традиционный способ исследования этих процессов с помощью измерения температуры в различных точках устройства не позволяет получить исчерпывающей физической картины. В свою очередь это существенно затрудняет построение адекватной физической модели, которая может

служить основой для расчётов рабочих характеристик КТТ при различных режимах и условиях её работы. Визуальные исследования позволяют получить дополнительную информацию и полнее раскрыть «секреты» работы этих устройств.

Проведены инструментальные и визуальные исследования процессов конденсации и перераспределения теплоносителя в контурной тепловой трубе (КТТ). Представлены результаты исследования теплообмена и гидродинамики при конденсации водяного пара в плоскощелевом конденсаторе с размерами 80x40x1 мм. Исследования проводились при температуре охлаждения конденсатора 20, 40 и 60°C. При всех рабочих режимах наблюдался расщеленный режим течения двухфазного потока и плѐночный тип конденсации. Измерялось температурное поле в конденсаторе, определялись коэффициенты теплоотдачи и термическое сопротивление, так же были проведены визуальные наблюдения за перераспределением жидкости в КТТ. Методом конфокальной микроскопии при некоторых режимных параметрах была измерена плѐнка конденсата.

В ходе эксперимента наблюдалось активное перераспределение теплоносителя между конденсатором и КП только при температурах охлаждения конденсатора близких к окружающей среде. При температуре охлаждения 20°C даже при высоких тепловых нагрузках конденсатор освобождается от теплоносителя не более чем на 50%. При температурах охлаждения 40°C и 60°C конденсатор практически сразу открывается на 90%. Использование интенсифицирующих вставок в конденсаторе позволяет повысить интенсивность теплообменных процессов. Это связано с удалением плѐнки жидкости из конденсатора за счёт капиллярных сил, эффекта эжекции, а также турбулизации плѐнки жидкости. Коэффициенты теплоотдачи при конденсации без интенсифицирующих вставок изменялись в диапазоне от 5,1 до 29,8 кВт/м²К, с направляющими вставками – от 5,2 до 35,4 кВт/м²К и со спиральными вставками – от 9,0 до 42,9 кВт/м²К.

Работа проведена при поддержке РФФИ, грант № 11-08-00369-а.

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННОЙ КАВИТАЦИИ ЛЕННАРД-ДЖОНСОВСКОЙ ЖИДКОСТИ

Бобров К.С.

ФГБУН Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: konst216@gmail.com

В данной работе, проводилось исследование кавитации жидкости методом молекулярной динамики (МД) в программном пакете LAMMPS с использованием GPU.

Межчастичное взаимодействие задавалось потенциалом Леннарда-Джонса, который учитывает как силы притяжения между молекулами, так и отталкивания, что позволяет моделировать вещество в растянутом состоянии (т.е. при отрицательных давлениях).

Исследовалась кавитация растянутой леннард-джонсовской жидкости при внедрении кластера из частиц другого рода. В работе исследовались система, содержащая 8788 частиц, помещённых в кубическую ячейку с периодическими граничными условиями. Все расчёты проводились в *NVE*-ансамбле. В качестве параметров обезразмеривания термодинамических величин использовались параметры потенциала Леннарда-Джонса для аргона: $\sigma = 0.3405$ нм, $\epsilon = 1.654019 \times 10^{-21}$ Дж, масса атома аргона $m = 6.6336 \times 10^{-26}$ кг, постоянная Больцмана $k_B = 1.3806504 \times 10^{-23}$ Дж/К. Шаг интегрирования классических уравнений движения по времени равнялся $\tau = 5 \times 10^{-15}$ с. Радиус обрезания потенциала составлял $r_c = 6.576\sigma$. Исследовалось влияние как наличия кристаллических кластеров различных размеров (содержащих $N = 1; 13; 32; 62$ частицы), так и различных интенсивностей взаимодействия частиц кластера с частицами материнской фазы (путём варьирования глубины потенциальной ямы $\epsilon_{int} \in [0.16\epsilon, 9.0\epsilon]$). Частицы, входящие в состав кластера, во всех экспериментах взаимодействовали друг с другом с энергетическим параметром потенциала взаимодействия 9.0ϵ . В ходе компьютерного эксперимента рассчитывались давление, температура и внутренняя энергия. Расчёты проведены при температуре $T^* = 0.7$.

Все эксперименты начинались с того, что формировалась жидкая система с кластером в стабильном, уравновешенном состоянии. В этом состоянии при заданной плотности получено более 100 начальных конфигураций системы. После этого все конфигурации переводились в область глубокой метастабильности, путём растяжения. Процесс кавитации жидкости фиксировался по резкому росту давления и температуры в системе. В эксперименте фиксировалось время ожидания появления в системе критического пузырька.

На основе результатов МД моделирования построены гистограммы времён ожидания критического пузырька. Установлено, что распределение событий кавитации во времени описывается пуассоновским распределением, как и в случае гомогенного зародышеобразования. МД моделирование показало, что присутствие в системе одной инородной частицы ($N = 1$), никак не влияет на время ожидания критического зародыша (при $\epsilon_{int} \in [0.16\epsilon, 9.0\epsilon]$), в то время как для кластеров больших размеров ($N = 13; 32; 62$) эта зависимость проявляется. При $\epsilon_{int} > 1$, пузырёк формируется в толще жидкости вдали от поверхности кластера (из-за большей локальной плотности частиц вблизи кластера). При $\epsilon_{int} < 1$, пузырёк формируется вблизи поверхности кластера (из-за слабого взаимодействия частиц на поверхности кластера). При $\epsilon_{int} \leq 1$, пузырёк образуется как в толще жидкости, так и вблизи поверхности кластера.

Вычисления велись на графических процессорах кластера «Уран» Института математики и механики УрО РАН (г. Екатеринбург) и в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН (г. Москва).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 12-08-00467, № 12-08-31225), Программы Президиума РАН (проект 09-П-2-1008).

РАСЧЁТЫ РАСТВОРИМОСТИ КАРБОНИТРИДОВ В МАЛОУГЛЕРОДИСТЫХ НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ СТАЛЯХ С V И Ti

Горбачёв И.И.* , Пасынков А.Ю.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

С помощью представленного ранее алгоритма [1] выполнен ряд расчётов, в которых исследовалась растворимость комплексных карбонитридов в системе Fe – V – Ti – C – N. Для проведения расчётов был выполнен критический анализ имеющейся информации по системе Fe – V – Ti – C – N, на основе которого было подобрано взаимосогласованное термодинамическое описание данной системы и входящих в неё подсистем. Расчёты были выполнены для диапазона составов, соответствующих малоуглеродистым низколегированным сталям в диапазоне температур, при которых обычно проводится аустенитизация. Пример результатов расчётов для стали с 0.1 мас. % Ti, и 0.1 мас. % V приведён на рис. 1, где показана зависимость фазового состава сплава (доля карбонитридной фазы, количество в ней Ti и C) от количества C и N в стали.

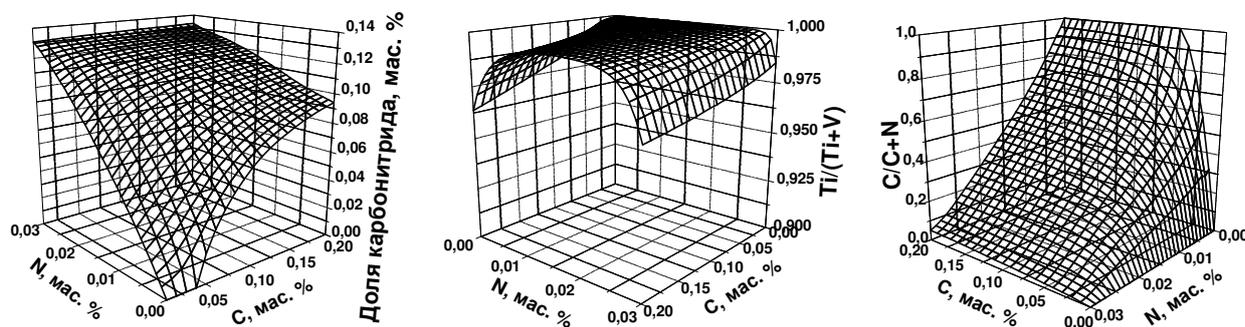


Рис. 1. Зависимость доли карбонида и его состава от содержания C и N в стали с 0.1 мас. % Ti и 0.1 мас. % V при температуре 1100°C.

На основе выполненных расчётов исследованы закономерности карбонитридообразования для системы Fe – V – Ti – C – N в диапазоне составов, соответствующих малоуглеродистым низколегированным сталям. Показано, что почти во всём исследованном диапазоне составов и температур в системе присутствует карбонитридная фаза, наиболее близкая по составу к карбонитриду титана. Состав данной фазы может заметно меняться в зависимости от количества легирующих элементов в стали, при этом ключевым параметром для анализа фазового состава системы является соотношение атомных долей Ti и N в сплаве.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 12-08-31539).

1. Попов В.В., Горбачев И.И., Физика металлов и металловедение, **98**, 11 (2004)

ОСОБЕННОСТИ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ РАСПЛАВОВ Cr – C ПРИ НЕБОЛЬШИХ СКОРОСТЯХ ОХЛАЖДЕНИЯ

Стерхова И.В., Камаева Л.В.*

Физико-Технический Институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия

*E-mail: lara_kam@mail.ru

Система Cr – C в области богатой хромом имеет простую диаграмму эвтектического типа, однако высокие температуры плавления, характерные для этих сплавов, а также высокая химическая активность затрудняют их исследования. Нет однозначного мнения о температурах большинства фазовых равновесий этой системы, температура эвтектического превращения по данным разных авторов отличается на 100°С. Исключение составляют химические соединения: Cr₃C₂, Cr₇C₃ и Cr₂₃C₆ структура и высокие эксплуатационные свойства которых хорошо изучены. Из них наибольший интерес вызывает низший карбид – Cr₂₃C₆, который образует эвтектику с α–Cr(C) и плавиться по перитектической реакции: Cr₂₃C₆ → L + Cr₇C₃. Структура этого карбида такова, что атомы хрома в нём легко замещаются атомами переходных металлов, что приводит к образованию целого семейства сложных карбидов M₂₃C₆ – τ-фаз. Чаще всего τ-фазы наблюдаются при кристаллизации аморфных сплавов, либо в сильно неравновесных условиях, и по мнению ряда авторов отвечают за склонность расплавов к аморфизации.

В связи с этим интересно изучить процессы кристаллизации расплавов Cr – C в концентрационном интервале существования фазы Cr₂₃C₆. Поэтому в работе методами дифференциального-термического анализа (ДТА) и металлографии исследовалось затвердевание сплавов Cr – C от 10 до 17 ат.% C. ДТА сплавов проводили в стандартных условиях, в режиме нагрева до 1680°С со скоростью 20 град/мин, выдержке при этой температуре в течение 20 мин и последующего охлаждения со скоростями 100, 20 и 50 град/мин. По термограммам нагрева и охлаждения определяли температуры плавления и кристаллизации для каждого сплава, а также переохлаждения (ΔT) в условиях которого начинается затвердевание.

Проведённые исследования показывают, что температура эвтектического превращения исследованных сплавов Cr – C составляет 1550°С. Условия затвердевания расплавов не зависят от скорости охлаждения и определяются их концентрацией. Кристаллизация всех доэвтектических сплавов начинается при небольших переохлаждениях по ликвидусу (~ 20°С). Переохлаждение второй стадии кристаллизации также не зависит от состава сплава, но составляет ~ 100°С. Кроме того, в области температур около 1350°С, на термограммах охлаждения наблюдается дополнительный экзотермический эффект, какое-либо структурно-фазовое превращение соответствующее этому эффекту на равновесной диаграмме отсутствует. Переохлаждение по ликвидусу заэвтектических сплавов линейно увеличивается с ростом концентрации от 20°С для эвтектического сплава (14ат.%Cr) до 140°С для сплава Cr₈₃C₁₇. Последующие этапы кристаллизации протекают аналогично доэвтектическим сплавам. Анализ описанных данных ДТА, а также исследование микроструктур слитков после охлаждения показывает, что в выбранных условиях охлаждения не зависимо от состава сплава наблюдается неравновесная кристаллизация: образованием непосредственно из расплава твёрдого раствора на основе хрома и при глубоких переохлаждениях неравновесной эвтектики α–Cr + Cr₇C₃, которая в процессе охлаждения распадается на равновесные фазы α–Cr и Cr₂₃C₆.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 13-03-31798мол_а.

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ МОДЕЛИ ХАББАРДА НА КВАДРАТНОЙ РЕШЁТКЕ МЕТОДОМ ТОЧНОЙ ДИАГНОАЛИЗАЦИИ

Кашин И.В.* , Мазуренко В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия*E-mail: kashin.i.v@yandex.ru

Одной из интересных задач в физике конденсированного состояния является исследование фазового перехода металл-изолятор в соединениях переходных металлов. Моделирование такого критического поведения составляет сложную методологическую и техническую проблему, так как её корректное решение связано с учётом различных энергетических и пространственных масштабов. В данной работе мы исследовали область перехода металл-изолятор на примере модели Хаббарда с половинным заполнением на квадратной решётке.

Решение квантовой задачи проводилось при помощи метода точной диагонализации матрицы гамильтониана «на лету» в рамках теории динамического среднего поля (DMFT). Были выполнены DMFT расчёты, в которых значение кулоновского взаимодействия варьировалось от $U = 2.2$ эВ до $U = 2.5$ эВ, а интеграл перескока выбран равным $t = 0.25$ эВ. Такие параметры широко используются для описания высокотемпературных сверхпроводников на основе меди. Кроме того, в ходе моделирования менялось число эффективных орбиталей примесного гамильтониана (N_S). Спектральные функции, полученные для температуры 0.02 К, представлены на рисунке 1.

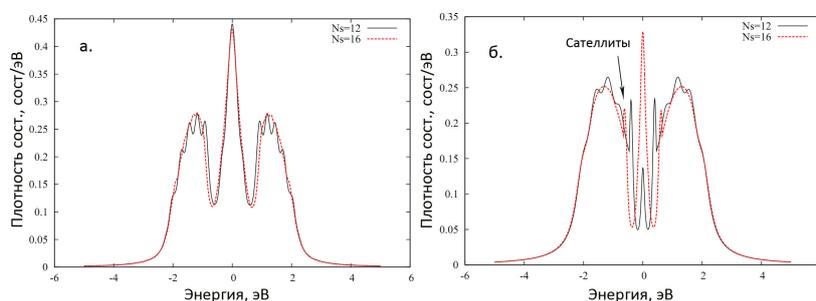


Рис. 1. Плотности состояний, полученные в DMFT расчётах с различными значениями кулоновского потенциала: а. $U = 2.2$ эВ; б. $U = 2.5$ эВ.

Видно, что при повышении параметра U ёмкость центрального пика уменьшается в связи с переходом в изоляторную фазу. Для модели с $U = 2.2$ эВ наращивание числа эффективных орбиталей с 12 до 16 не дало никаких качественных изменений. Однако в области перехода (при $U = 2.5$ эВ) спектральная функция продолжает меняться с увеличением числа орбиталей. Это означает, что присутствуют возбуждения совершенно различных энергий.

В работе [1] отмечалось, что в критической области модели Хаббарда на решётке Бете наблюдаются узкие пики, сателлиты, на ближайших к уровню Ферми границах хаббардовских зон. В случае квадратной решётки мы наблюдаем похожие возбуждения. Дальнейшие исследования будут направлены на детализацию спектра в области нахождения сателлитов путём увеличения числа эффективных орбиталей модели Андерсона.

Исследования выполнены при поддержке гранта Президента РФ МК-406.2011.2, РФФИ 12-02-90810 и гранта Министерства образования и науки 12.740.11.0026.

1. Karski M., Raas C., Götz S.U., Single-particle dynamics in the vicinity of the Mott-Hubbard metal-to-insulator transition, Phys. Rev. B, **77**, 075116 (2008)

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ PuMGa_5

Лукоянов А.В.^{1,2*}, Шориков А.О.^{1,2}, Анисимов В.И.¹

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

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

Открытие в 2002 году сверхпроводимости в соединении PuCoGa_5 с рекордной для соединений f -элементов критической температурой 18.5 К, а позднее и в ряде соединений - структурных аналогов, вызвало большой интерес. Исследование сверхпроводимости в данном классе соединений было продолжено изучением легированного материала $\text{Pu}(\text{Co}_x\text{M}_{1-x})\text{Ga}_5$ с различными концентрациями переходных металлов M , в частности, соседей Co по 3d-группе, железа и никеля. Экспериментальные результаты измерения магнитной восприимчивости этих соединений свидетельствуют о сверхпроводимости до 13.5 К, 10.0 К, 16.4 К для 10% и 20% Fe и 10% Ni, соответственно. Однако в случае изоструктурного соединения с иридием PuIrGa_5 при любых концентрациях иридия сверхпроводимость не обнаружена.

В настоящей работе проведено исследование электронной структуры и магнитных свойств соединений PuMGa_5 ($M = \text{Co}, \text{Fe}, \text{Ni}, \text{Rh}, \text{Ir}$) в рамках метода LDA+U+SO. Применявшийся метод учитывает как сильные электрон-электронные корреляции, так и спин-орбитальное взаимодействие в 5*f*-оболочке актиноидного металла. Рассмотрены особенности электронной структуры, типа связи, электронной конфигурации, магнитного состояния иона плутония в зависимости от типа переходного металла в PuMGa_5 . Полученные оценки эффективного магнитного момента иона плутония хорошо согласуются с известными экспериментальными значениями. Впервые показано, что заселённость d -состояний переходного металла коррелирует с появлением сверхпроводимости в соединениях данного класса, обеспечивая режим оптимального легирования в электронной подсистеме.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта Министерства образования и науки и проекта 12-2-004-ЯЦ УрО РАН.

Вязкость расплавов Al – Co (до 10 ат.% Co)

Меньшикова С.Г.^{1*}, Бельтюков А.Л.¹, Ладьянов В.И.¹, Корепанов А.Ю.², Мухгалин В.В.¹

¹Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия

²НИИ Термофизики новых материалов ФГБОУВПО УдГУ, г. Ижевск, Россия

*E-mail: svetlmensh@mail.ru

Система Al-Co характеризуется сильным взаимодействием компонентов, которое приводит к образованию нескольких химических соединений в твёрдом состоянии [1] и наличию ярко выраженных особенностей на концентрационных зависимостях свойств расплавов (например, [2]). Дополнительный интерес представляют сплавы этой системы с низким содержанием кобальта. Это связано с образованием в ней эвтектики (Al + Co₂Al₉) при относительно небольшом содержании кобальта (~ 0.68 ат.% [1]). Между тем вопрос о структуре расплавов в системах с эвтектической фазовой диаграммой, в том числе жидких сплавов Al-Co, остаётся дискуссионным и актуальным. При изучении особенностей изменения структурного состояния расплавов часто используются косвенные методы, основанные на измерении температурных и концентрационных зависимостей структурно-чувствительных свойств, в частности, вязкости.

В данной работе изучены температурные и концентрационные зависимости вязкости (ν) расплавов Al-Co (до 10 ат.% Co).

Температурные зависимости вязкости, полученные в режимах нагрева и охлаждения, совпадают и имеют монотонный характер. При анализе политерм вязкости использовали уравнение Аррениуса. Для расплавов, содержащих до 1,5 ат.% Co на зависимостях логарифма вязкости от обратной температуры $\ln \nu \sim f(1/T)$ наблюдается излом в области 910-950°C (перегрев выше ликвидуса до 300°C). Температура излома близка к температуре распада интерметаллида Co₂Al₉ (945°C) [1]. При содержании кобальта более 1,5 ат.% зависимости $\ln \nu \sim f(1/T)$ описываются линейной функцией во всем исследованном интервале температур.

По полученным политермам построили концентрационные зависимости вязкости и энергии активации вязкого течения. Энергию активации вязкого течения для составов до 1,5 ат.% Co рассчитывали до и после излома, для остальных составов – во всем исследованном температурном интервале. Изотермы вязкости и энергии активации вязкого течения при температурах выше температуры излома на политермах имеют монотонный характер с ростом значений при увеличении содержания кобальта. Однако концентрационная зависимость энергии активации вязкого течения в интервале температур от ликвидуса до температуры излома на политермах имеет немонотонный характер с максимумом вблизи 0,3 и минимумом в области 0,6-0,8 ат.% кобальта.

Обнаруженные особенности политерм вязкости, а также концентрационных зависимостей энергии активации вязкого течения вблизи ликвидуса, по-видимому, обусловлены изменением типа ближнего упорядочения в жидких сплавах при изменении температуры и состава.

Работа выполнена при поддержке программы интеграционных фундаментальных исследований УрО РАН, проект № 12-И-2-2031 и гранта РФФИ № 12-03-31400 мол_а.

1. Диаграммы состояния двойных металлических систем, Под общей ред. Н.П. Лякишева, **Т.1**, Машиностроение (1996)
2. Левин Е.С., Гельд П.В., Аюшина Г.Д. // Изв. Вузов. Цветная металлургия, №5, 111 (1972)

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВОВ Al – Fe (до 10 ат.% Fe)

Меньшикова С.Г.^{1*}, Бельтюков А.Л.¹, Ладыанов В.И.¹, Корепанов А.Ю.², Суслов А.А.¹

¹Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия

²НИИ Термофизики новых материалов ФГБОУВПО УдГУ, г. Ижевск, Россия

*E-mail: svetlmensh@mail.ru

Система Al-Fe со стороны алюминия характеризуется наличием эвтектического равновесия $J \leftrightarrow (Al) + FeAl_3$ с температурой, близкой к температуре плавления Al (646-655°C), и незначительной растворимостью Fe в твёрдом Al ($\sim 0,03$ ат.% при 652°C), уменьшающейся с понижением температуры [1]. Расплавы системы Al-Fe являются микронеоднородными вследствие сильного взаимодействия между разноимёнными компонентами, сохраняющими такое состояние при значительных перегревах над ликвидусом [2]. Дополнительную информацию об особенностях их структуры можно получить изучением структурно-чувствительных свойств, в частности, вязкости.

В данной работе методом затухающих крутильных колебаний цилиндрического тигля с расплавом исследованы температурные зависимости вязкости (ν) расплавов Al-Fe (до 10 ат.% Fe).

Температурные зависимости вязкости расплавов содержащих менее 3 ат.% железа, полученные в режимах нагрева и охлаждения, совпадают. Для расплавов с более высоким содержанием железа (> 3 ат.%) температурные зависимости в режиме нагрева и охлаждения не совпадают: значения вязкости в режиме нагрева выше значений, полученных в режиме охлаждения.

С целью выяснения причин гистерезиса были проведены исследования временных зависимостей вязкости расплава $Al_{95}Fe_5$ при температурах, превышающих ликвидус на 20, 100 и 200°C, в течение длительных изотермических выдержек (~ 200 мин). На временной зависимости вблизи ликвидуса наблюдается длительный (~ 90 мин) рост значений в начале изотермической выдержки. Далее значения вязкости стабилизировались. При более высоких температурах также наблюдается рост значений вязкости в начале выдержки, но время, в течение которого устанавливаются стабильные значения вязкости, уменьшается с увеличением температуры расплава. Методами металлографии изучено влияние термовременной обработки (варьирование температуры и времени выдержки) расплава на структуру слитков сплава, получаемых при одинаковой скорости охлаждения (~ 150 град/мин). Обнаружена ярко выраженная седиментация кристаллов соединения $FeAl_3$ в слитках, полученных после термовременной обработки расплава длительностью 10 мин при температурах 950°C и 1050°C (на временных зависимостях соответствует росту значений вязкости). На слитках, полученных после длительной термообработки расплава (более 90 мин), седиментации кристаллов интерметаллида не выявлено. Следовательно, можно полагать, что гистерезис поллитерм и рост значений на временных зависимостях вязкости расплавов связаны с седиментацией кристаллов интерметаллида $FeAl_3$ и последующим их растворением.

Работа выполнена при поддержке программы интеграционных фундаментальных исследований УрО РАН, проект № 12-И-2-2031 и гранта РФФИ № 12-03-31400 мол_а.

1. Диаграммы состояния двойных металлических систем, Под общей ред. Н.П. Лякишева, **Т.1**, Машиностроение (1996)
2. Бродова И.Г., Яблонских Т.И. и др., Физика металлов и металловедение, **102**, 556 (2006)

ВЛИЯНИЕ ИСХОДНОГО СОСТОЯНИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ УПОРЯДОЧЕННОЙ СТРУКТУРЫ В СПЛАВЕ Cu – 49ат.%Pd

Новикова О.С.* , Клюкин И.В., Леушина В.С., Волков А.Ю.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: oksanov@e1.ru

Целью настоящей работы является изучение формирования упорядоченного состояния в образцах сплава Cu-49ат.%Pd, находящихся в различных исходных состояниях.

В работе использовались образцы двух видов: проволока для резистометрии диаметром 0.22 мм и пластинки для рентгеноструктурного анализа толщиной 0.2 мм. Полученные значения степени истинной деформации после ИПД: $\epsilon \approx 7.1$ (для тонкой проволоки) и $\epsilon \approx 3.8$ (для пластинок).

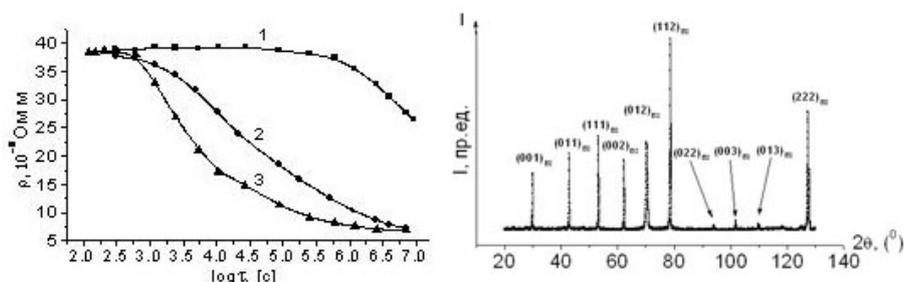


Рис. 1. Слева — Зависимость удельного электросопротивления от времени выдержки при температуре 350°C образцов сплава Cu-49Pd, находящихся в различных исходных состояниях: 1 – после закалки от 700°C, 1 час.; 2 – деформация: $\delta = 90\%$; 3 – интенсивная пластическая деформация: $\epsilon = 7.1$. Справа — Рентгеновская дифрактограмма образца сплава Cu-49Pd после длительного упорядочения после интенсивной пластической деформации ($\epsilon = 3.8$).

Изменение электросопротивления тесно связано с проходящими в сплавах Cu-Pd фазовыми превращениями: в ходе установления атомного порядка величина удельного электросопротивления сплавов медь-палладий уменьшается в несколько раз.

На рис. 1 (слева) приведены графики зависимости удельного электросопротивления образцов сплава Cu-49Pd от продолжительности отжига при температуре 350°C. Изменение электросопротивления закалённого сплава (кривая 1) начинается после длительного инкубационного периода: небольшое снижение наблюдается после выдержки более 24 часов. По сравнению с закалённым состоянием, сплав, деформированный на 90% (кривая 2), имеет более высокую скорость превращения. Падение электросопротивления образца сплава, испытывавшего интенсивную пластическую деформацию, наиболее сильное (кривая 3). Таким образом, интенсивная пластическая деформация существенно ускоряет протекание процесса упорядочения в сплаве Cu-49ат.%Pd.

С использованием интенсивной пластической деформации и последующей длительной термообработки в сплаве Cu-49ат.%Pd удалось сформировать практически однофазное, упорядоченное по типу *B2* состояние (рис. 1, справа). Стоит отметить, что для более детального изучения полученного структурного состояния требуется проведение подробного электронно-микроскопического исследования.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 12-02-31491) и Уральского отделения РАН (проект № 12-У-2-1004).

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$ ($x = 0.55 - 0.65$) ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Мельникова Н.В., Хейфец О.Л., Пинигина К.С.*, Филиппов А.Л.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,

г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: ksenechka66@gmail.com

Работа посвящена синтезу и исследованию электрических свойств многокомпонентных халькогенидов $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$ ($x = 0.55 - 0.65$) при температурах 78–400 К и давлениях 15–45 ГПа. Обнаружено, что соединения являются смешанными электронно-ионными проводниками.

Исследование электрических свойств проводили с помощью метода диэлектрической импедансной спектроскопии. Электрические характеристики в области частот 1 кГц–1000 кГц измеряли с помощью измерителя-анализатора импеданса RLC-2010. Измерения при высоких давлениях проводились на порошкообразных образцах. Давления до 45 ГПа получали с помощью камеры высокого давления типа «закруглённый конус – плоскость» из поликристаллических алмазов «карбонадо».

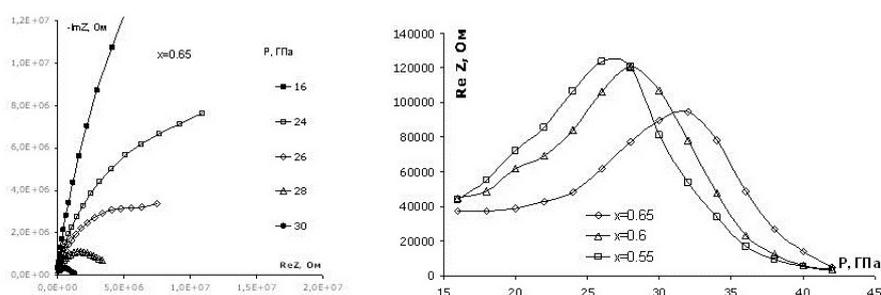


Рис. 1. Годографы импеданса $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$ ($x = 0.65$) при высоких давлениях и барические зависимости реальной части импеданса ($\text{Re}Z$).

Для материалов характерно наличие двух хорошо разделяющихся областей на частотной зависимости импеданса и адмиттанса: высокочастотной, характеризующей свойства образца, и низкочастотной, характеризующей влияние электродного импеданса.

На Рис. 1 приведены годографы импеданса $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$ ($x = 0.65$) при высоких давлениях и барические зависимости реальной части импеданса ($\text{Re}Z$).

Диаметр окружности с ростом давления уменьшается. При некотором давлении для всех образцов наблюдается резкое уменьшение как действительной, так и мнимой частей импеданса. Уменьшение давления приводит к возвращению характеристик годографов к своим первоначальным значениям, наблюдавшимся до увеличения давления. Наблюдаемый вид годографов импеданса характерен для материалов с ионной проводимостью.

В результате проведённой работы были сделаны следующие выводы:

Материалы $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$ ($x = 0.55 - 0.65$) являются ионными проводниками с долей ионного переноса 60–99% и областью температур начала ионного переноса 180 К–260 К в зависимости от состава.

Приложение к материалам давлений до 48 ГПа приводит к появлению областей существенных изменений электрических свойств в областях давлений ~ 32 ГПа, ~ 28 ГПа и ~ 26 ГПа для $x = 0.65$, 0.6 и 0.55 соответственно. Увеличение доли меди приводит к смещению области существенных изменений электрических свойств в сторону более низких давлений.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТЕКОЛЬНОЙ ДИНАМИКИ СИСТЕМЫ
КОЛЛАПСИРУЮЩИХ СФЕР

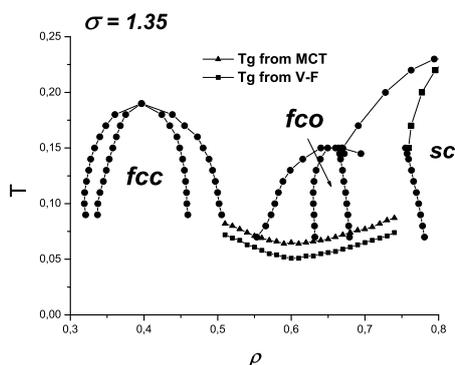
Рыльцев Р.Е.^{1*}, Щелкачев Н.М.^{2,3}, Рыжов В.Н.³, Шуняев К.Ю.¹

¹Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, г. Москва, Россия

³Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, г. Москва, Россия

*E-mail: rrylcev@mail.ru



Методами равновесной молекулярной динамики исследованы свойства перехода жидкость-стекло в системах, испытывающих структурные перестройки при изменении давления. Для описания таких систем мы использовали модель «коллапсирующих сфер» – систему с потенциалом мягких сфер, к которому добавлена отталкивающая добавка большего радиуса:

$$U(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{d}{r} \right)^n + \frac{1}{2} (1 - \tanh [k_0(r - \sigma)]) \right] \quad (1)$$

При расчётах мы полагали $n = 14$, $k_0 = 10$, $\sigma = 1.35$. Параметры ε и d служили соответственно единицами энергии и длины при стандартной процедуре обезразмеривания единиц [1].

Для проведения компьютерного моделирования мы использовали пакет DL_POLY 2.20. Все расчёты осуществлялись на кластере «Уран» на базе суперкомпьютерного центра УрО РАН.

Система, состоящая из 5000 частиц, моделировалась при периодических граничных условиях в NVT ансамбле, реализованном термостатом Нозе-Хувера. Шаг интегрирования составлял 0.01 в безразмерных единицах. Для каждой исследованной плотности система предварительно релаксировалась при высокой температуре, а затем последовательно охлаждалась вплоть до температуры, при которой безразмерный коэффициент самодиффузии был порядка 10^{-5} . Для оценки температуры стеклования при каждой температуре и плотности вычислялись значения коэффициентов самодиффузии. Затем, полученные температурные зависимости аппроксимировались законом Фогеля-Фулчера и степенным законом из теории связанных мод. Полученные зависимости $T_g(\rho)$ изображены на рисунке совместно с равновесной фазовой диаграммой, полученной ранее в работе [2].

Исследованная система представляет собой практически единственный пример однокомпонентной системы с изотропным потенциалом, в которой удалось обнаружить переход в стекло методами равновесной молекулярной динамики. Такое уникальное поведение может быть объяснено посредством модели квазибинарной смеси частиц с диаметрами, соответствующими твёрдому и мягкому ядрам потенциала (1).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 12-03-00757-а), Уральского отделения РАН (проект РЦП-12-ПЗ) и программы президиума РАН (№ 12-П-3-1013).

1. D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, 2nd ed. Academic, New York, 2002
2. Yu.D. Fomin, N.V. Gribova, V.N. Ryzhov, S.M. Stishov, Daan Frenkel, J. Chem. Phys. **129**, 064512 (2008)

УЧЁТ ЗАВИСИМОСТИ ЭНЕРГИЙ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ КОМПОНЕНТ БИНАРНОГО СПЛАВА ПРИ АНАЛИЗЕ ЕГО ВОЗМОЖНЫХ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ

Халиков А.Р.^{1*}, Дмитриев С.В.²

¹)ФГОБУ ВПО Уфимский государственный авиационный технический университет, Россия

²)ФГБУН Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

*E-mail: khalikov.albert.r@gmail.com

При взаимодействии химических элементов между собой в условиях, соответствующих протеканию химической реакции, могут образовываться различные продукты, что может изображаться на фазовых диаграммах состояния, например, в координатах состав – температура. На промежуточные фазы диаграмм состояния следует обратить особое внимание, так как типов диаграмм существует множество, а перераспределение различных сортов атомов в объёме сплава приводит к различным значениям его потенциальной энергии и параметров ближнего порядка. В некоторых случаях взаимодействие элементов в определённых стехиометрических концентрациях приводит к возникновению сверхструктур.

Проанализируем пример образования промежуточной фазы $A_n B_m$ на бинарной диаграмме состояния. Для этого выберем две фазовые диаграммы состояния, одну эвтектического типа, а другую с инконгруэнтно плавящейся промежуточной фазой $A_n B_m$. Зависимости энергий связи пар атомов для структуры эвтектического типа будут $\phi_{AB}^{(1,2)} > \phi_{AA}^{(1,2)}$ и $\phi_{AB}^{(1,2)} > \phi_{BB}^{(1,2)}$ [1]. Следовательно, при образовании промежуточной фазы состава $A_n B_m$, в некотором интервале состава сплава, зависимости энергий связи пар атомов изменятся таким образом, чтобы было энергетически выгодно образование промежуточной фазы определённого состава. В качестве упрощения математической модели примем, что изменение энергий связи пары атомов в зависимости от концентрации происходит по линейному закону. При добавлении одного из компонентов в сплаве произойдут изменения, связанные с общим количеством валентных электронов в общей массе сплава, что, в свою очередь, повлечёт за собой изменение энергий связи атомов и возможность изменения фазового состава.

Исследовав изменения энергий связи пар атомов на первой и второй координационной сфере для простых фазовых диаграмм состояния, переходим к анализу диаграммы Ni – Al, элементы которой образуют упорядочивающиеся сплавы со сверхструктурами $B2(\text{NiAl})$, $L1_2(\text{Ni}_3\text{Al})$. Иными словами, энергии связи пар атомов изменяются с изменением концентрации Ni. Для построения структур аналогичных тем, что присутствуют на диаграмме состояния Ni-Al, необходимо рассматривать диаграмму состояния участками. Каждый такой участок разделяет диаграмму состояния с упорядоченными промежуточными фазами на более простые виды (типы) диаграмм. Например, в интервале от $n = 0$ до $n \approx 20$ % Ni формируется диаграмма с эвтектическим равновесием, в интервале от $n = 0$ до $n \approx 45$ % Ni диаграмма с инконгруэнтно плавящейся промежуточной фазой. В интервале от $n \approx 45$ до $n \approx 70$ % Ni формируется диаграмма состояния с перитектическим равновесием, и в интервале от $n \approx 70$ до $n = 99,99$ % Ni – диаграмма состояния с промежуточными фазами, образующимися в твёрдом состоянии.

1. Халиков А.Р., Искандаров А.М., Дмитриев С.В. Влияние состава на энергии бинарных сплавов в разупорядоченном состоянии и после отжига // Ползуновский вестник. Вып. 1-1, 301-304 (2012)

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА AgFeAsSe_3 и AgFeSbSe_3 ПРИ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Хейфец О.Л.*^{*}, Нугаева Л.Л., Тебеньков А.В., Волегов А.С., Шакиров Э.Ф., Мельникова Н.В., Филиппов А.Л.

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: olga.kobeleva@usu.ru

Синтез и исследование электрических, магнитных и механических свойств многокомпонентных полупроводников на основе халькогенидов серебра и меди в экстремальных условиях (низкие температуры, высокие давления, большие магнитные поля) представляет интерес для физики конденсированного состояния.

Работа посвящена исследованию электрических и магнитных свойств AgFeAsSe_3 и AgFeSbSe_3 в широком диапазоне температур, давлений и магнитных полей. По данным рентгеноструктурного анализа, синтезированные материалы представляют собой смесь двух фаз – FeSe и AgBSe_2 ($B=\text{As, Sb}$).

Исследования температурных зависимостей импеданса проводились с использованием метода импедансной спектроскопии на измерителе-анализаторе импеданса RLC-2010 в области частот 1 кГц–1МГц и температур 78К–400 К. Для генерации давлений до 48 ГПа использовали камеру высокого давления с наковальнями типа «закруглённый конус - плоскость» из искусственных поликристаллических алмазов «карбонадо». Измерение намагниченности AgFeAsSe_3 проводилось на SQUID-магнитометре MPMS XL7 в области температур 100–400 К и магнитных полей до 7 Тл.

Из исследований комплексного сопротивления материалов было обнаружено, что годографы импеданса в высокочастотной части могут быть аппроксимированы дугой полуокружности. Температурная зависимость электропроводности AgFeAsSe_3 активационного типа, смена энергии активации происходит в области температур 240–280 К. В области температур 220–250 К на температурной зависимости сопротивления наблюдается аномалия сопротивления, такая же, какая была обнаружена при измерениях на постоянном токе в области температур 260–270 К, т.е. увеличение частоты приводит к смещению области аномалии в сторону более низких температур. Диэлектрическая проницаемость с ростом температуры растёт, причём при нагреве на частоте 200 кГц наблюдается небольшой максимум в области температур ~ 240 К, однако при измерениях на частоте 93 кГц этот максимум практически незаметен. Температурная зависимость электропроводности AgFeSbSe_3 активационного типа со сменой энергии активации при 220 К. В этой же области температур наблюдается рост диэлектрической проницаемости.

Намагниченность AgFeAsSe_3 падает в области температур до ~ 310 К и остаётся практически постоянной при дальнейшем увеличении температуры. Возможно, это связано с переходом образца из парамагнитного состояния в состояние с магнитным упорядочением при температурах ниже 310 К. Эти результаты согласуются с полученными ранее исследованиями при меньших полях и температурах.

Исследование барических зависимостей сопротивления образцов показало, что в AgFeAsSe_3 существует фазовый переход при 25 ГПа, а для AgFeSbSe_3 при 24 ГПа. Таким образом, с учётом погрешностей, замена мышьяка на сурьму не приводит к изменению области возникновения фазового перехода.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОЁМКОСТИ ОДНОМЕРНОГО ИЗИНГОВСКОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА

Шабунина Е.В, Шабунин М.Е., Удодов В.Н.

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан, Россия

E-mail: galichinaev@mail.ru

Невозможность вычисления статистического интеграла для трёхмерных объектов приводит нас к необходимости использования модельных упрощений. Одномерная модель может служить хорошим приближением для некоторых особенных физических систем. Формирование магнитной подсистемы пониженной размерности связано с особенностями строения кристаллической решётки данного вещества [1,2].

В данной работе рассчитана теплоёмкость для одномерной модели Изинга при различных температурах (температура выражена в единицах J_1/k_B), размерах системы и энергиях взаимодействия во второй координационной сфере. При исследовании модели использовались методы численного моделирования, в основе которых лежит классический алгоритм Метрополиса с модифицированным выражением для энергии

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

Метод измерения теплоёмкости основан на связи C со статистическими флуктуациями полной энергии в каноническом ансамбле.

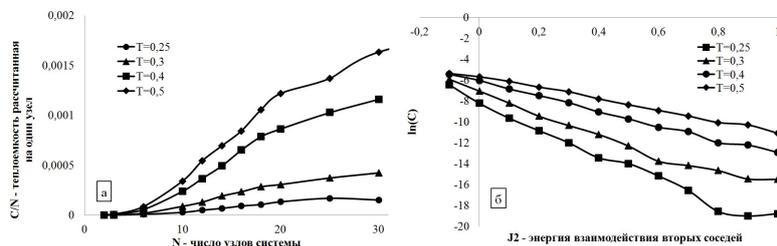


Рис. 1. а) Зависимость теплоёмкости C/N , рассчитанной на один узел, от размеров системы. б) Зависимость натурального логарифма теплоёмкости от энергии взаимодействия во второй координационной сфере J_2 .

Зависимость теплоёмкости от размеров системы является монотонно возрастающей для всех исследуемых температур. Если рассмотреть значения теплоёмкости на узел системы, то мы увидим, что с ростом размеров системы зависимость от N ослабевает (рис. 1,а). Влияние взаимодействия во второй координационной сфере проявляется следующим образом: рост энергии взаимодействия во второй координационной сфере приводит к постепенному уменьшению теплоёмкости. При низкой температуре это влияние наиболее сильное. Если мы построим график зависимости натурального логарифма теплоёмкости от J_2 , то увидим что с ростом температуры эта зависимость приближается к линейной (рис. 1,б). Температурная зависимость теплоёмкости для одномерной системы имеет характерный максимум. При увеличении размеров системы он становится более выраженным и узким, однако его расположение по шкале температур сохраняется. Увеличение радиуса взаимодействия приводит к смещению максимума в область более высоких температур, делая его более пологим.

1. Стенли Г., Фазовые переходы и критические явления, Мир (1973)
2. Александров К.С., Магнитные фазовые переходы в галоидных кристаллах, Наука (1983)

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АМОРФНЫХ ХАЛЬКОГЕНИДОВ СИСТЕМЫ Ag – Ge – As – S

Шакиров Э.Ф.*, Хейфец О.Л., Мельникова Н.В., Бабушкин А.Н.

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: shakirov.eldar@gmail.com

Работа посвящена исследованию электрических свойств соединений в системе Ag-Ge-As-S при низких температурах и высоких давлениях.

Для генерации давлений в диапазоне 16 - 48 GPa использовали камеру высокого давления с наковальными типа «закруглённый конус – плоскость» из искусственных поликристаллических алмазов «карбонадо». Электрические свойства полученных образцов исследовались с помощью измерителя-анализатора импеданса RLC-2010 в области частот 1 – 1000 kHz методом импедансной спектроскопии. По данным рентгеноструктурного анализа синтезированные материалы $\text{AgGe}_{1+x}\text{As}_{1-x}\text{S}_3$ ($x = 0, 0.1, 0.4-0.9$) рентгеноаморфны.

Исследования халькогенидов $\text{AgGe}_{1+x}\text{As}_{1-x}\text{S}_3$ показывают, что при высокой скорости охлаждения расплава при $0.4 \leq x \leq 0.9$ образуются стеклообразные однородные материалы, при $x=0$ и $x=0.1$ образуется аморфная матрица с шарообразными микровключениями, обогащёнными серебром, при этом существенно повышается (по сравнению с однородными стёклами) доля ионного переноса и снижаются температуры начала ионного переноса.

Соединение	Область температур начала ионного переноса, К	Доля ионной проводимости, %
AgGeAsS_3	120-150	99.7
$\text{AgGe}_{1.1}\text{As}_{0.9}\text{S}_3$	280-290	96.5
$\text{AgGe}_{1.4}\text{As}_{0.6}\text{S}_3$	190-200	73
$\text{AgGe}_{1.5}\text{As}_{0.5}\text{S}_3$	180-190	54
$\text{AgGe}_{1.6}\text{As}_{0.4}\text{S}_3$	170-180	67
$\text{AgGe}_{1.7}\text{As}_{0.3}\text{S}_3$	180-200	50
$\text{AgGe}_{1.9}\text{As}_{0.1}\text{S}_3$	320-330	72

В результате исследований при высоких давлениях был сделан вывод, что зависимость области существенных изменений электрических свойств от доли германия немонотонна.

Соединение	Область изменения электрических характеристик, обратимость свойств
AgGeAsS_3	37 GPa - обратимый
$\text{AgGe}_{1.1}\text{As}_{0.9}\text{S}_3$	38 – 40 GPa - необратимый
$\text{AgGe}_{1.4}\text{As}_{0.6}\text{S}_3$	31 – 35 GPa - необратимый
$\text{AgGe}_{1.5}\text{As}_{0.5}\text{S}_3$	35 – 38 GPa - необратимый
$\text{AgGe}_{1.6}\text{As}_{0.4}\text{S}_3$	27 – 30 GPa - необратимый
$\text{AgGe}_{1.7}\text{As}_{0.3}\text{S}_3$	30 – 33 GPa - необратимый
$\text{AgGe}_{1.9}\text{As}_{0.1}\text{S}_3$	38 – 40 GPa - необратимый

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

УЧЁТ ДИНАМИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В РАСЧЁТАХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК В СОЕДИНЕНИИ FeSi

Шориков А.О.^{1,2*}, Лукоянов А.В.^{1,2}, Мазуренко В.В.², Анисимов В.И.^{1,2}

¹)Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²)Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

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

При повышении температуры в соединении FeSi происходит переход от диамагнитного полупроводника с малой энергетической щелью, порядка 60 мэВ, к плохому металлу с локальными магнитными моментами ионов железа. Далее, при высоких температурах кривая магнитной восприимчивости подчиняется закону Кюри-Вейсса. Установлено, что применение стандартных подходов зонной теории, таких как приближение локальной электронной плотности (LDA), не позволяет в полной мере описать спектральные характеристики и зонную структуру соединения FeSi, в виду упрощённого рассмотрения электрон-электронного взаимодействия и отсутствия температурной зависимости характеристик. Так, в фотоэмиссионных спектрах с угловым разрешением (ARPES) для соединения FeSi экспериментально обнаружено двукратное сужение зон вблизи уровня Ферми в сравнении результатами подхода LDA. Вероятнее всего, такое сужение зон является проявлением корреляционных эффектов в электронной подсистеме соединения FeSi.

В настоящей работе проведено исследование спектральных характеристик с учётом динамических электронных корреляций в рамках метода LDA+DMFT, сочетающего преимущества первопринципного подхода при построении невзаимодействующего гамильтониана с возможностями метода теории динамического среднего поля (DMFT) при учёте многоэлектронных эффектов для этого гамильтониана. Для построения гамильтониана использовалась процедура проектирования на базис функций Ванье, проведённая с использованием самосогласованных результатов расчёта в приближении обобщённой градиентной поправки (GGA) в пакете программ Quantum-Espresso. Гамильтониан включал все состояния элементов кремния и железа, включённых в псевдопотенциал, таким образом, эффекты гибридизации состояний были полностью учтены.

Проведённые LDA+DMFT расчёты для соединения FeSi дали для параметра температуры $\beta=40$ 1/эВ ~ 290 К полупроводник с узкой щелью с небольшой плотностью электронных состояний, обусловленной тепловым размытием. Сравнение с некоррелированными $3d$ плотностями состояний железа из исходного гамильтониана показывает, что узкий незаполненный пик шириной 0,4 эВ, располагающийся непосредственно над уровнем Ферми, образуя щель, в расчётах методом LDA+DMFT усиливается, что указывает на перераспределение электронных состояний. При этом сильнее проявляется e_g^π орбитальный характер данных состояний. Заполненные состояния по-прежнему образуют широкую зону шириной 3,5-4 эВ с квазичастичными пиками e_g характера около 0,5 эВ и широкой нижней хаббардовской зоной вокруг 1-1,5 эВ ниже уровня Ферми.

Таким образом, расчёты с учётом динамических электронных корреляций для FeSi позволяют воспроизвести диэлектрический характер спектральных характеристик при низких температурах и определить их орбитальный характер.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 10-02-00046-а и 12-02-33076 - мол_a_вед, МК-3376.2011.2, программы «Развитие научного потенциала университетов», гранта Министерства образования и науки № 14.A18.21.0076.

О ЗАМЕРЗАНИИ ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ В МЕДЬ-ВОДЯНЫХ КОНТУРНЫХ ТЕПЛОВЫХ ТРУБАХ

Юшакова С.И.

Учреждение Российской академии наук Институт теплофизики УрО РАН,
г. Екатеринбург, Россия

E-mail: s.yushakova@gmail.com

Медь-водяные контурные тепловые трубы (КТТ) являются высокоэффективными теплопередающими устройствами, которые находят применение в системах охлаждения электроники, в частности, в системах охлаждения компьютерных серверов. Теплофизические свойства воды позволяют создавать устройства, способные обеспечить в диапазоне рабочих температур пара 50-100°C передачу тепловых потоков до 1000 Вт. Однако особенность воды расширяться при замерзании создаёт проблемы при хранении и транспортировке данных устройств в условиях отрицательных температур из-за существующей опасности разрушения элементов КТТ. Поэтому актуальной задачей является выбор альтернативного теплоносителя, который позволял бы избежать появления разрушающих деформаций при замерзании теплоносителя, а также сохранить высокие тепловые характеристики водяных КТТ.

В рамках данной работы было экспериментально доказано, что добавление к воде метанола в количестве от 0,05 до 1,0% по объёму препятствует разрушающему действию образующегося льда. На рис. 1 показан контейнер со стеклянными пробирками, наполненными бинарным теплоносителем вода-метанол с концентрацией метанола 0; 0,05; 0,1; 0,5 и 1%, до и после замораживания. Из рисунка видно, что после выдержки контейнера в течение 12 часов при температуре окружающей среды от -18°C до -28°C разрушенной оказалась только пробирка с чистой водой (рис. 1в).

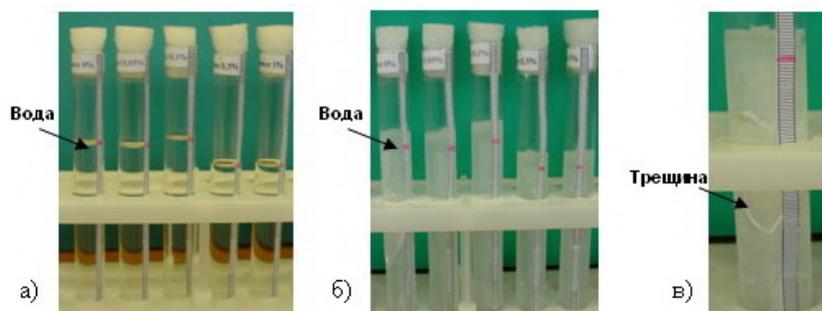


Рис. 1. Общий вид контейнера с пробирками: а) до замораживания; б) после замораживания; в) фрагмент пробирки с водой после замораживания.

Для оценки влияния добавок метанола на тепловые характеристики медь-водяных КТТ был разработан и изготовлен экспериментальный образец медной КТТ с плоским испарителем толщиной 7 мм. Устройство было испытано с чистой водой в качестве теплоносителя, а также с бинарными смесями вода-метанол с концентрацией метанола 0,1; 0,5 и 1%. Испытания показали, что при максимальной тепловой нагрузке 200 Вт различие в значениях температур пара при использовании бинарного теплоносителя и чистой воды не превышает 3°C. Таким образом, концентрация метанола в бинарном теплоносителе в пределах 0,1-1,0% является достаточной, чтобы избежать появления разрушающих деформаций при отрицательной температуре и, вместе с тем, позволяет получить рабочие характеристики, близкие к характеристикам, достигаемым с водой.

На следующем этапе работы планируется провести исследования по термоциклированию медной КТТ с бинарным теплоносителем вода-метанол с концентрацией метанола 0,5%.

Работа проведена при поддержке РФФИ, грант № 11-08-00369-а.

Проводимость и транспортные
явления

Проводимостр и шрванслоршнргс

~ o ~

АНИЗОТРОПИЯ ДЛИН СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ В КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ. РОЛЬ ФОКУСИРОВКИ ФОНОНОВ

Кулеев И.И.¹, Кулеев И.Г.¹, Бахарев С.М.^{1*}, Инюшкин А.В.²¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия²НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия*E-mail: sergeybm@mail.ru

В упруго анизотропных кристаллах возникает явление фононной фокусировки, т.е. фононы данной ветви спектра распространяются преимущественно в выделенных кристаллографических направлениях [1-3]. при достаточно низких температурах, когда длина свободного пробега фононов превышает поперечный размер образца (режим граничного рассеяния), фокусировка фононов приводит к анизотропии теплопроводности $\kappa(T)$. В этом случае $\kappa(T)$ зависит не только от геометрических размеров образца, но и от его ориентации относительно кристаллографических осей [3]. В режиме граничного рассеяния (ниже максимума) $\kappa(T)$ оказывается выше в тех направлениях, где имеет место фокусировка фононов, причём изменение величин теплопроводности для различных ориентаций образцов кремния достигала 50%. Полученные для теплопроводности результаты [3] интерпретировались в рамках теории Казимира [4], обобщённой на случай упруго анизотропных кристаллов. Авторы [3] рассчитали величины теплопроводности и длин свободного пробега фононов кристаллов Si и CaF₂ только для симметричных направлений при температуре 3 К. Оказалось, что в режиме граничного рассеяния $\kappa(T)$ максимальна в направлении фокусировки [3]. Однако авторам [3] не удалось получить аналитических выражений для функций, определяющих релаксацию фононов в образцах конечной длины.

В отличие от [3] нам удалось [5] решить эту задачу аналитически в общем случае для произвольного направления градиента температур относительно осей кристалла. Определены времена релаксации фононов различных поляризаций при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины с круглым и квадратным сечениями, необходимые для расчётов температурных зависимостей теплопроводности кубических кристаллов. В модели анизотропного континуума проанализирована анизотропия средних длин свободного пробега фононов и длин свободного пробега для каждой из ветвей фононного спектра кристаллов кремния. Рассмотрены угловые зависимости длин свободного пробега для двух наиболее актуальных случаев: 1) ось образца (и, соответственно, градиент температуры) вращается в плоскости грани куба; 2) ось образца вращается в диагональной плоскости. Показано, что при переходе от образцов бесконечной длины к образцам конечной длины анизотропия длин свободного пробега фононов заметно уменьшается [5]. Установлена связь между направлениями фокусировки фононов различных поляризаций и максимальными значениями длин свободного пробега фононов для кристаллов кремния при низких температурах. Показано, что длины свободного пробега каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях ее фокусировки, причём, в этих направлениях они превосходят длины пробега остальных колебательных мод.

Работа выполнена по плану РАН в рамках темы № 01.2.006.13395 при поддержке программы ОФН РАН грант № 12-Т-2-1018, фонда «Династия», а также гранта ведущей научной школы НШ-6172.2012.2.

1. H.J. Maris, J. Acoust. Soc. Am. **50**, 812 (1971)
2. M. Lax and V. Narayanamurti, Phys. Rev. B **22**, 4876 (1980)
3. A.K. McCurdy, H.J. Maris, and C. Elbaum, Phys. Rev. B **2**, 4077 (1970)
4. H.V.G. Casimir, Physica **5**, 495 (1938)
5. И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев, С.М. Бахарев, А.В. Инюшкин, ФТТ **54**, (2012) в печати.

Влияние гибридизации примесных состояний на электронную подвижность $\text{Hg}_{1-x}\text{Me}_x\text{Se}$ ($\text{Me} = \text{Fe}, \text{Co}$)

Окулов В.И.¹, Лончаков А.Т.¹, Говоркова Т.Е.¹, Дерюшкин В.В.², Бобин С.Б.²

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

В настоящем докладе представлены результаты экспериментального исследования электронных свойств бесщелевого полупроводника HgSe с малыми концентрациями $3d$ -примесей Fe $n_{\text{Fe}} = (7 \cdot 10^{18}, 2 \cdot 10^{19}) \text{ cm}^{-3}$ и Co $n_{\text{Co}} = (1 \cdot 10^{18}, 3 \cdot 10^{18}, 7 \cdot 10^{18}) \text{ cm}^{-3}$ в магнитных полях $B = 2 \text{ Т}$ в температурном интервале $T = (2 \div 150) \text{ К}$. Также приведены температурные зависимости концентрации $n_e(T)$, проводимости $\sigma_e(T)$ и подвижности $\mu_e(T)$ электронов. На их основании определены значения кинетических параметров носителей заряда при температуре $T = 4, 2 \text{ К}$.

Проведён количественный анализ полученных температурных зависимостей электронной подвижности $\mu_e(T)$ в рамках теории резонансного рассеяния [1] (рис. 1).

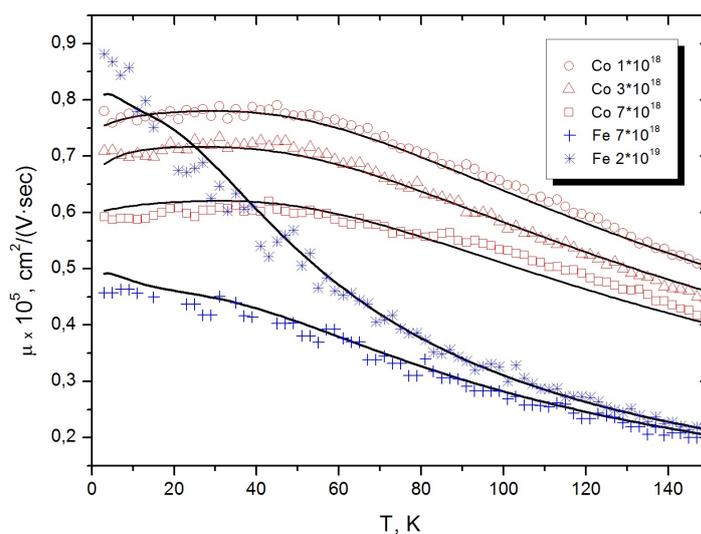


Рис. 1. Температурные зависимости подвижности в $\text{Hg}_{1-x}\text{Me}_x\text{Se}$ (эксперимент и теория).

Показано, что немонотонная температурная зависимость электронной подвижности $\mu(T)$ в системах $\text{Hg}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Se}$ ($x=0,0035 \div 0,1$) ат.% и $\text{Hg}_{1-x}\text{Co}_x\text{Se}$ ($x=0,005 \div 0,035$) ат.% согласуется с представлением о наличии донорного уровня d -примесей в полосе проводимости матрицы и $p-d$ -гибридизации электронных состояний. В результате количественного анализа полученных экспериментальных зависимостей $\mu(T)$ в рамках модели одного эффективного пика в плотности состояний определены значения параметров, характеризующих гибридизацию электронных состояний на примесях Co и Fe .

Работа выполнена при поддержке гранта № 11-02-90410-Укр_ф_a.

1. Окулов В.И., Говоркова Т.Е., Гудков В.В., Жевстовских И.В., Королев А.В., Лончаков А.Т., Окулова К.А., Памятных Е.А. и др., ФНТ, **33**, 282 (2007)

НОВЫЕ ДАННЫЕ О МАГНИТНЫХ И РЕЗИСТИВНЫХ СВОЙСТВАХ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ $\text{La}_{0.85}\text{Ba}_{0.15}\text{MnO}_3$ И $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$, ИМЕЮЩИХ ОТНОШЕНИЕ К КОЛОССАЛЬНОМУ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЮКуркин М.И., Гудин С.А.*, Гапонцева Н.Н., Нейфельд Э.А., Королёв А.В., Угрюмова Н.А.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Величина магнитосопротивления (МС) $\Delta\rho/\rho = (\rho(0) - \rho(H))/\rho(H)$ в манганитах на порядки больше МС других веществ. Для объяснения этого колоссального МС (КМС) рассматриваются различные механизмы, учитывающие электронные, магнитные и решёточные свойства манганитов. Однако, до сих пор удовлетворительного теоретического описания температурной зависимости КМС не получено. Несмотря на огромный объём публикаций по манганитам, микроскопический механизм КМС до сих пор остаётся предметом острых дискуссий [1-6].

В нашей работе предложен новый подход, позволяющий значительно ограничить число механизмов ответственных за КМС в манганитах лантана. Исследована температурная зависимость электросопротивления и магнитного момента кристаллических образцов манганитов в интервале температур $40 \div 300$ К в магнитных полях до 90 кЭ. Проведённый анализ позволил выдвинуть жёсткое требование к дополнительным механизмам ответственным за КМС, - они не должны существовать вдали от T_C . Показано, что расчёты на основе $s - d$ модели [7] с достигнутой в настоящее время экспериментальной точностью количественно описывают МС рассматриваемых манганитов ниже температуры Кюри T_C без привлечения других моделей МС. Однако эта модель оказалась неспособной описать экспериментальные кривые $\rho(T, H)$ вблизи T_C . Разность $\Delta\rho(T, 0) = (\rho(T, 0) - \rho_{mod}(T, 0))$ между экспериментальной $\rho(T, 0)$ и модельной $\rho_{mod}(T, 0)$ кривыми имеет вид узкого пика с максимумом вблизи T_C и полушириной на полувысоте $\delta T \approx \pm 10$ К. Обсуждается механизм формирования $\Delta\rho$ в образцах с разбросом величин T_C за счёт неоднородностей химсостава. Если размер ферромагнитных включений и парамагнитных прослоек меньше длины свободного пробега носителя тока без переворота спина, то в таком образце должен иметь место механизм магнитосопротивления типа гигантского магнитосопротивления (ГМС) в мультислоях Fe/Cr. Анализируется влияние различий электронных спектров металлов и полупроводников, а также геометрии распределений магнитных неоднородностей в мультислоях и объёмных манганитах, на величины ГМС. Делается вывод, что с учётом этих особенностей ГМС может стать причиной колоссального магнитосопротивления (КМС), наблюдаемого в допированных манганитах лантана.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (Проект 11-02-00093) и Президиума РАН (Проект 12-П-2-1041).

1. Coey J., Viret M., von Molnar S., Adv. Phys. **48**, 167 (1999)
2. Dagotto E., Nanoscale phase separation and colossal magnetoresistance, Berlin: Springer-Verlag (2002)
3. Изюмов Ю.А., Скрыбин Ю.Н., УФН, **171**, 121 (2001)
4. Каган М.Ю., Кугель К.И., УФН **171**, 577 (2001)
5. Бебенин Н.Г. ФММ, **111**, 242, (2011)
6. Гамзатов А.Г., Батдалов А.Б. и др., ФТТ, **54**, 576 (2012)
7. Вонсовский С.В., Магнетизм, Наука (1971)

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КВАНТОВОГО ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ В СТРУКТУРАХ n – InGaAs/GaAs С ДВОЙНЫМИ СИЛЬНО-СВЯЗАННЫМИ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ

Арапов Ю.Г., Гудина С.В.*, Неверов В.Н., Подгорных С.М., Якунин М.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Температурная зависимость квантового времени жизни электронов $\tau_q(T)$ определяется тремя механизмами рассеяния. Рассеяние на ионизованных примесях является упругим и от температуры (T) не зависит. Два других механизма: на фононах и электронов на электронах зависят от T . При рассеянии электронов на фононах время рассеяния (τ_q^{e-ph}) сравнимо с транспортным временем релаксации носителей (τ_{tr}) , и для структур с селективным легированием (со спейсером) выполняется соотношение $(\tau_q^{e-ph}(T))^{-1} \approx (\tau_{tr})^{-1} \ll (\tau_q^{e-e}(T))^{-1}$. Таким образом, зависимость $\tau_q(T)$ связана с температурной зависимостью времени электрон-электронного рассеяния $\tau_q^{e-e}(T)$.

Исследование квазидвумерных структур дало много новых методик изучения $\tau_q(T)$. В частности, в структурах с двумя квантовыми ямами эффекты туннелирования между ямами напрямую связаны с размытием уровней энергии электронных состояний и, следовательно, с τ_q . В нулевом магнитном поле в балансе (концентрации носителей заряда в ямах равны) и в случае несимметричного рассеяния (подвижности носителей заряда в ямах отличаются друг от друга) наблюдается резонансное сопротивление [1]. В параллельном магнитном поле $B_{||}$ это резонансное сопротивление подавляется, причём скорость подавления зависит от T и связана с $1/\tau_q(T)$.

Проведены измерения компонент тензора сопротивления $\rho_{xx}(B, T)$ и $\rho_{xy}(B, T)$ при $1.8 < T < 70$ К в наклонных магнитных полях $B(B_{||}, B_{\perp})$ при детальном сканировании плоскости $(B_{||}, B_{\perp})$ в пределах всей окружности от полного значения магнитного поля 9 Т, до нуля с использованием прецизионного электронно-управляемого программируемого вращателя фирмы «Quantum Design». Полученные зависимости $\rho_{xx}(B_{||}, T)$ были проанализированы в модели [1]: $B \parallel k_y$, $\rho^{-1}(B_{||}) - \rho_{off}^{-1} = [\rho(0)^{-1} - \rho_{off}^{-1}] f(B_{||}/B_C)$, где ρ_{off} - минимальное значение сопротивления, $f(x) = 2[(1+x^2)^{-0.5} - 1]x^{-2}$, соответствующее выходу системы из резонанса. Характеристическое магнитное поле B_C равно: $B_C = \frac{\hbar}{e} \frac{1}{v_F \tau_q b} \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta_{SAS}}{\hbar}\right)^2 \left(\frac{\tau_{tr}^1 + \tau_{tr}^2}{2} \tau_q\right)}$, где v_F - скорость Ферми, Δ_{SAS} - туннельная щель, b - расстояние между центрами ям.

Установлено, что в баллистическом режиме в интервале температур, где $k_B T/E_F < 0.1$, наблюдаемая квадратичная зависимость $\tau_q(T)$ определяется неупругим электрон-электронным рассеянием. Показано, что полученная зависимость $\tau_q^{e-e}(T)$ количественно во всем диапазоне температур существующими теориями [см. обзор 2] не описывается.

Работа выполнена при поддержке Программы президиума РАН 12-П-2-1051 и РФФИ грант 11-02-00427.

1. Palevski A. *et al.*, Phys.Rev.Lett. **65**, 1929 (1990); Berk Y., *et al.* Phys. Rev. B **51**, 2604 (1995)
2. Dietrich S., Vitkalov S., Dmitriev D., Bykov A., Phys. Rev. B **85**, 115312 (2012)

РАСЧЁТ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ Cu_2Se и Ag_2Se ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Давлетшина А.Д.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

E-mail: davletshinaalisa@rambler.ru

Халькогениды меди и серебра являются смешанными ионно-электронными проводниками. Данные соединения широко используются в различных технических устройствах. При этом к электронной составляющей проводимости предъявляются особые требования. Электронное строение позволяет установить характер связи между ионами, что необходимо для понимания ионной проводимости. Этим обусловлен интерес к исследованию электронного строения халькогенидов меди и серебра.

Расчёт зонной структуры суперионных проводников Cu_2Se (ГЦК) и Ag_2Se (ОЦК) в высокотемпературной кубической фазе был выполнен из первых принципов с помощью программного пакета Quantum Espresso [1]. При высоких температурах наблюдается особое суперионное состояние, характеризующееся структурным разупорядочением кристаллической решётки. Фазовые переходы в кристаллах с перестройкой кристаллической решётки вызывают изменения зонной структуры [2,3].

При расчётах зонной структуры были использованы ультрамягкие псевдопотенциалы для Cu и Ag, а для Se – сохраняющие норму. Энергия обрезки плоских волн имела величину, равную $35 R_y$ (476 эВ). Использовался автоматический выбор точек обратной решётки (k-точек) при помощи метода Монкхорста-Пака. Размерность k-сетки для интегрирования по зоне Бриллюэна составляла $3 \times 3 \times 3$.

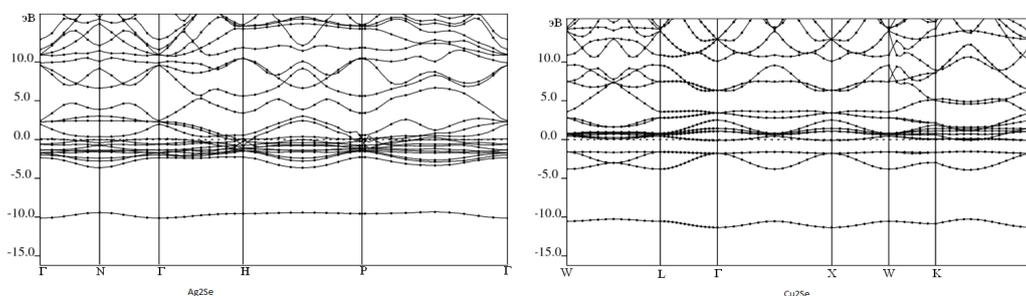


Рис. 1. Зонная структура Ag_2Se (слева); зонная структура Cu_2Se (справа).

Зонные структуры Cu_2Se и Ag_2Se представлены на рис. 1. Зависимость энергии от волнового вектора в обоих соединениях имеет подобный характер. Для зонной структуры Ag_2Se характерна гибридизация d -состояний металла как с s -, p -состояниями аниона, так и с собственными s -, p -орбиталями. В случае Cu_2Se $2s$ -, $2p$ -, $3s$ -состояния селена не участвуют в гибридизации с s -, p -, d -состояниями меди. В результате чего селенид серебра имеет более высокую ионную проводимость по сравнению с селенидом меди и, как следствие, меньшую энергию активации. Потенциал кристаллической решётки становится более однородным. Для зонной структуры исследуемых соединений в суперионном состоянии характерно отсутствие запрещённой зоны.

1. Quantum-ESPRESSO: <http://www.quantum-espresso.org>
2. Garba E.J.D., Jacobs R.L., Physica., **138** B, 253 (1986)
3. Kashida S., Watanabe N. et al., Solid State Ionics. **148**, 193 (2002).

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ДИОКСИД ОЛОВА – СЕРЕБРО

Добросмыслов С.С.^{1,2*}, Кирко В.И.², Нагибин Г.Е.², Попов З.И.¹

¹⁾Сибирский государственный аэрокосмический университет им. академика М.Ф. Решетнева,
г. Красноярск, Россия

²⁾Сибирский Федеральный Университет, г. Красноярск, Россия

*E-mail: Dobrosmislov.s.s@gmail.com

Диоксид олова полупроводник (*n*-типа) с энергией запрещённой зоны 3,54 эВ, высокая химическая стойкость которого позволяет использовать данный материал в химически агрессивных средах. Композит на основе диоксида олова обладает широким спектром применения в первую очередь – это электроника, электротехника, электрохимия, катализ, биотехнология, металлургия, атомная и химическая промышленность и др..

Использование добавок различных высокодисперсных окислов металлов ZnO, CuO, MnO₂, CoO, Fe₂O₃ позволяет значительно улучшить спекаемость материалов, а для улучшения электрических свойств добавляются V₂O₅, Sb₂O₃.

Однако, несмотря на значительное снижение электросопротивления в высокотемпературной области, при комнатной температуре материал продолжает оставаться диэлектриком, решить данную проблему предлагается путём введения УДП (ультрадисперсные порошки) добавки серебра, которая позволит существенно увеличить концентрацию носителей заряда в зоне проводимости.

Методика эксперимента.

Керамика была получена по классической технологии. Плотность образцов измерялась по методике гидростатического взвешивания в спирте, открытая пористость — по ГОСТ 2409-95, удельное электросопротивление в диапазоне температур 20-1000°С измерялось 4-х зондовым методом [1]. Механические свойства (предел прочности на сжатие) измерялись с помощью прибора Instron 3369. Кристаллическая структура синтезированных керамик контролировалась рентгеноструктурным анализом на приборе XRD 6000. Электронная микроскопия осуществлялась на растровом электронном микроскопе JEOL JSM-6490 LV.

Результаты эксперимента.

В процессе обжига происходит выпадение частиц серебра с характерным размером порядка 1 мкм, причём частицы серебра распределены не равномерно, что препятствует перколяции электрического тока.

Использование добавок оксида серебра при получении керамики на основе диоксида олова позволяет существенно снизить удельное электрическое сопротивление композиционного материала, в особенности при низких температурах, что связано с восстановлением металлического серебра из оксида. Данный эффект связан с образованием зоны пространственного заряда в контакте полупроводник-металл. Температурные зависимости удельного электросопротивления для материалов с массовой долей серебра 4 и 8 % практически совпадают.

Работа выполнена в рамках реализации федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 - 2013 годы» и при поддержке гранта РФФИ 12-03-31323.

1. Kirko V.I., Dobrosmislov S.S., et. al., Journal of SFU. Engineering & Technologies, 3, 256-262 (2008)

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНДУЦИРОВАННОГО ДАВЛЕНИЕМ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК В ПЕРОВСКИТЕ FeSiO_3 МЕТОДОМ LDA+DMFT

Дьяченко А.А.^{1*}, Шориков А.О.^{1,2}, Лукоянов А.В.^{1,2}, Анисимов В.И.^{1,2}

¹)Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²)ФГАОУ ВПО УрФУ, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: dyachenko@imp.uran.ru

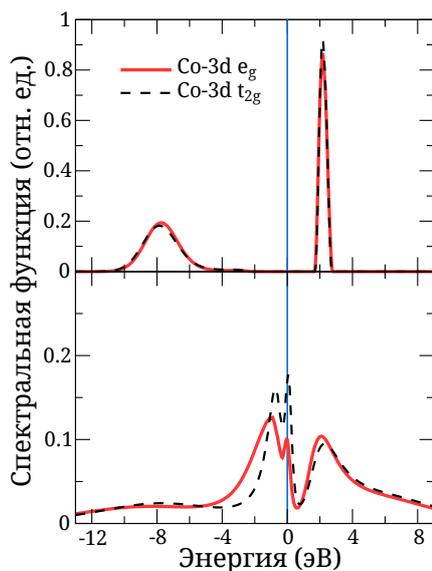


Рис. 1. Спектральные функции Co-3d состояний полученные методом LDA+DMFT.

Для расчётов использовался GGA-гамильтониан в базе функций Ваннье, содержащий O-2p и Fe-3d состояния для правильного учета гибридизации между состояниями кислорода и железа. Примесная задача DMFT решалась методом СТ-QMC с температурой $T = 1160$ К. Для учёта кулоновского взаимодействия в Fe-3d, были использованы параметры $U = 6.4$ эВ и $J = 1$ эВ, полученные в constrain-LDA расчёте.

Для оценки влияния давления на магнитные свойства системы и качественного исследования перехода металл-диэлектрик расчёты были проведены в кубической аппроксимации (пространственная группа Pm-3m). На рис. 1 приведены спектральные функции Fe-3d состояний рассчитанные для нормального давления и давления, соответствующего 25% сжатию ячейки (≈ 100 ГПа). По результатам расчётов FeSiO_3 при нормальном давлении является диэлектриком с щелью порядка 4 эВ, тогда как при 100 ГПа система уже находится в металлическом состоянии. Величина локального магнитного момента составляет $4.9 \mu_B$ при нормальном давлении и $3.8 \mu_B$ при 100 ГПа.

Результаты проведённых нами вычислений свидетельствуют о наличии перехода металл-диэлектрик в перовските FeSiO_3 и необходимости дальнейшего исследования системы в реальных структурах с учётом искажений.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 10-02-00046-а и 12-02-33076-мол_а_вед.

1. Badro J., Rueff J.P., Vanko G. et al., Science **305** (5682), 383–386 (2004)
2. Bengtson A., Persson K., Morgan D., Earth and Planet. Sci. Lett. **265**, 535-545 (2008)
3. Stackhouse S., Brodholt J.P., Price G.D., Earth Planet. Sci. Lett. **253** (1–2), 282–290 (2007)
4. Cohen R.E., Mazin I.I., Isaak D.G., Science **275** (5300), 654–657 (1997)

СКЕЙЛИНГ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $n - \text{InGaAs}/\text{GaAs}$ В РЕЖИМЕ КВАНТОВОГО ЭФФЕКТА ХОЛЛА

Клепикова А.С.* , Неверов В.Н., Гудина С.В., Харус Г.И., Шелушнина Н.Г., Якунин М.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: as_klepikova@mail.ru

В гипотезе двухпараметрического скейлинга квантовый эффект Холла (КЭХ) объясняется как последовательность квантовых фазовых переходов между локализованными и делокализованными (вблизи середины подзон Ландау) состояниями в спектре неупорядоченной 2D системы в квантующем магнитном поле [1, 2]. В этой модели ширина перехода между соседними плато КЭХ должна стремиться к нулю при уменьшении температуры по степенному закону T^κ [1, 3]. Показатель степени $\kappa = p/2\nu$ (множитель p определяет температурную зависимость времени неупругого рассеяния $\tau_{in} \sim T^{-p}$, $\nu = 7/3$ – критический индекс длины локализации) является универсальной величиной, которая характеризует механизмы рассеяния носителей заряда.

Экспериментально изучены магнитополевые зависимости продольного $\rho_{xx}(B)$ и холловского $\rho_{xy}(B)$ сопротивления в режиме целочисленного квантового эффекта Холла в наноструктурах $n - \text{InGaAs}/\text{GaAs}$ с двойной квантовой ямой в широком диапазоне магнитных полей 0-12 Тл и температур 0.05-4.2 К, до и после инфракрасной (ИК) подсветки. Исследована температурная зависимость ширины переходов плато-плато КЭХ и, тем самым, получены сведения о температурной зависимости ширины полосы делокализованных состояний $\nu_0(T)$ вблизи середины подзон Ландау в квантующем магнитном поле.

Обнаружено реальное скейлинговое поведение $\nu_0(T) \sim T^\kappa$ для перехода $1 \rightarrow 2$ в неосвещённом образце ($\kappa = 0.48 \pm 0.04$) и для переходов $2 \rightarrow 3$ ($\kappa = 0.22 \pm 0.01$) и $3 \rightarrow 4$ ($\kappa = 0.21 \pm 0.01$) в образце после воздействия ИК - излучения. Найденные значения κ близки к теоретически предсказанным значениям для обычного ферми-жидкостного механизма неупругого электрон-электронного рассеяния ($\tau_{in} \sim T^{-2}$, $\kappa = 0.42$) или для найквистовского механизма электрон-электронного рассеяния ($\tau_{in} \sim T^{-1}$, $\kappa = 0.21$) в 2D-системах. Эти результаты замечательно соответствуют предсказаниям теории двухпараметрического скейлинга, что позволяет сделать вывод о хорошем качестве (однородности) исследованных образцов с двойной квантовой ямой, особенно, после ИК подсветки.

Наблюдаемую для перехода $1 \rightarrow 2$ в структуре после ИК-подсветки линейную зависимость $\nu_0(T) = \alpha T + \beta$ (с конечным значением β) мы связываем с изменением соотношения масштаба случайного потенциала и длины волны электрона (магнитной длины) и с эффективным переходом к крупномасштабному потенциалу в ультраквантовой области магнитных полей.

Работа выполнена по Программе президиума РАН 12-П-2-1051 и при частичной поддержке РФФИ грант 11-02-00427.

1. Хмельницкий Д.Е., Письма в ЖЭТФ, **38**, 454 (1983)
2. Pruisken A.M.M., The Quantum Hall Effect, ed R.E. Prange and S.M. Girvin Springer Verlag, (1990)
3. Huckestein B., Rev. Mod Phys. **67**, 367 (1995)

СПЕКТРЫ МОДУЛЯ АДМИТАНСА ТОНКИХ АМОРФНЫХ КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК С СОДЕРЖАНИЕМ МАГНИТНОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ

Ласёк М.П.*, Власов В.С., Котов Л.Н., Кирпичёва О.А.

Сыктывкарский государственный университет, г. Сыктывкар, Россия

*E-mail: mpLasek@yandex.ru

Тонкие композитные плёнки формируют комплекс физических свойств, например, гигантское магнитосопротивление [1], возможность изменения удельного электрического сопротивления на несколько порядков в зависимости от состава композита. В данной работе были получены спектры модуля адмитанса тонких (100÷500 нм) плёнок в диапазоне частот от 9 кГц до 3 ГГц. Получены зависимости модуля адмитанса от концентрации металлической фазы для разных частот. Состав композитных плёнок был следующим: $(\text{Co}_{45}\text{Ta}_{45}\text{Nb}_{10})_x(\text{SiO}_2)_y$, $0.30 < x < 0.60$, $3 < y < 12$, где связь y с x определялась уравнением $y \approx 21 - 30 \cdot x$. Плёнки были получены методом ионно-лучевого напыления в атмосфере аргона при давлении $P=4 \cdot 10^{-4}$ Торр [2]. Химический состав плёнок определялся с использованием электронного растрового сканирующего микроскопа JSM-6400 [3]. Для определения спектра модуля адмитанса был использован анализатор спектра GSP-7830. При концентрации металлической фазы $x < 0.35$, с ростом частоты тока через плёнку, увеличивается модуль адмитанса. Существование сильной частотной зависимости модуля адмитанса для плёнок с малыми концентрациями x , свидетельствует о том, что эта зависимость может быть связана с наличием диэлектрических слоёв между металлическими гранулами. Участок поверхности плёнки образованный диэлектриком, расположенным между металлическими гранулами можно представить в виде конденсатора. Композитные плёнки при малых концентрациях металлической фазы состоят из совокупности конденсаторов, проводимость которых увеличивается с ростом частоты. Максимум модуля проводимости исследуемых плёнок наблюдается при частоте 2500 МГц при $x < 0,35$. Такой рост модуля адмитанса для исследуемых плёнок с магнитной металлической фазой может быть связан с прыжковой проводимостью электронов через локализованные состояниями в диэлектрической фазе. При $0.35 < x < 0.44$ также наблюдается рост модуля адмитанса в плёнке с меньшим тангенсом угла наклона модуля адмитанса. С увеличением металлической составляющей в плёнке, происходит уменьшение тангенса угла наклона модуля адмитанса. При $0.44 < x < 0.54$ модуль адмитанса увеличивается до частоты 800 МГц. При частоте выше 800 МГц, модуль адмитанса уменьшается, за счёт увеличения индуктивного сопротивления в плёнке, которое возрастает с ростом частоты. Для $0.54 < x < 0.6$ ёмкостные свойства плёнки не выражены, что связано с образованием бесконечного числа проводящих каналов. Тангенс угла наклона модуля адмитанса отрицательный, вследствие роста индуктивного сопротивления плёнки с частотой.

Итак, в данной работе были получены спектры модуля адмитанса в ВЧ и СВЧ диапазоне для тонких аморфных композитных плёнок, с магнитной металлической фазой. Обнаружено, что при концентрациях $x < 0.35$ наблюдается максимум адмитанса в СВЧ диапазоне, который связан с возникновением в плёнках прыжковой проводимости через локализованные состояния в диэлектрических областях.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (номера грантов: 10-02-01327-а, 12-02-01035-а)

1. Helman J.S., Abeles B. Tunneling of Spin-Polarized Electrons and Magnetoresistance in Granular Ni Film, Phys. Rev. Lett, V.37, N.21, 1429-1433 (1976)
2. Y.E.Kalinin et al., Physics and chemistry of processing of materials, 14 (2001)
3. L.N. Kотов et.al., Advanced Materials Research, 706, 47-50 (2008)

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ БЫСТРОЗАКАЛЁННЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

Михалицына Е.А.*, Катаев В.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: evgenia.mihalitsyna@gmail.com

Аморфные и нанокристаллические магнитомягкие сплавы находят широкое применение в технике, электронике и приборостроении. Одним из преимуществ таких сплавов является высокое удельное электросопротивление, которое, главным образом, влияет на снижение магнитных потерь в образце.

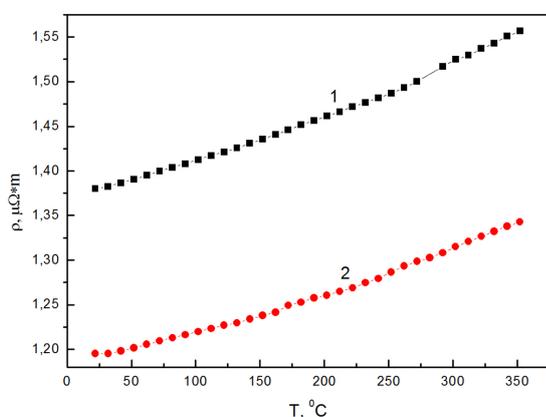


Рис. 1. Температурные зависимости удельного электросопротивления нанокристаллического сплава FeCuNbSiB в состояниях после закалки (1) и после ТМО (2).

При изучении температурных зависимостей динамических магнитных свойств важную роль играет поведение электросопротивления. В данной работе исследованы температурные зависимости электросопротивления аморфного сплава FeNiSiB и нанокристаллического сплава FeCuNbSiB в различных структурных состояниях в широком диапазоне температур. Измерение электросопротивления быстроохлаждённых лент сплавов проводили по 4-х зондовому методу.

На рис.1 в качестве примера приведены полученные в работе температурные зависимости удельного электросопротивления для сплава FeCuNbSiB. Видно, что состояние сплава после закалки характеризуется высоким удельным электросопротивлением со значениями характерными для аморфных сплавов на основе железа [1]. После проведения термообработки на нанокристаллизацию, совмещённой с обработкой в магнитном поле — ТМО, происходит значительное уменьшение удельного электросопротивления (рис. 1, кривая 2). Это обусловлено изменением структурного состояния сплава в результате отжига с формированием нанокристаллической структуры, для которой характерно наличие сверхмелких кристаллических зёрен, погруженных в остаточную аморфную матрицу. Видно, что при этом характер зависимости и средние значения температурного коэффициента сопротивления сохраняются.

В работе также были получены аналогичные зависимости для аморфного сплава FeNiSiB в состояниях после закалки и после отжига на релаксацию закалочных напряжений, в результате которого сплав продолжает оставаться в аморфном состоянии.

В работе также были получены аналогичные зависимости для аморфного сплава FeNiSiB в состояниях после закалки и после отжига на релаксацию закалочных напряжений, в результате которого сплав продолжает оставаться в аморфном состоянии.

1. K. Pekaia, M. Pekaia, I. Skorva'nek, Journal of Non-Crystalline Solids, **374**, 27 (2004)

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА СВЕРХПРОВОДНИКА LiFeAs: LDA+DMFT ПОДХОД

Новоселов Д.Ю.*, Скорняков С.Л., Лукоянов А.В., Анисимов В.И.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Открытие нового класса высокотемпературных слоистых Fe – As сверхпроводников [1] послужило причиной возникновения интереса исследователей к данному классу соединений.

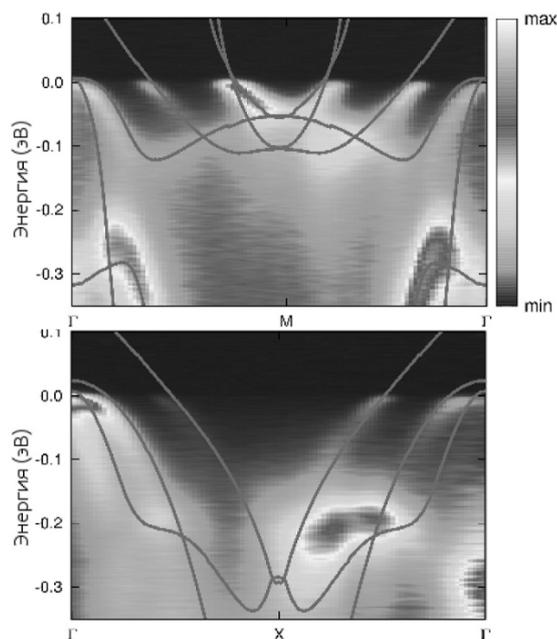


Рис. 1. Зонная структура LiFeAs вдоль ГМГ и ГХГ направлений в зоне Бриллюэна (линии) в сравнении с данными ARPES (контур) [5].

В настоящей работе проведено исследование роли кулоновских корреляций в формировании спектральных свойств сверхпроводника LiFeAs, обладающего температурой перехода в сверхпроводящее состояние $T_c = 18$ К. Для этого использовался метод LDA+DMFT, объединяющий в себе теорию функционала плотности и теорию динамического среднего поля [2,3]. Для решения вспомогательной примесной задачи применялся алгоритм квантового Монте-Карло с непрерывным временем (CT-QMC) в варианте разложения по гибридизации. Эффективный 16-ти зонный гамильтониан для данной системы, содержащий пять Fe – d орбиталей и три As – p орбитали, был построен путём проектирования на функции Ванье [4].

Рассчитанное распределение спектрального веса в k -пространстве (Рис. 1) находится в хорошем согласии с данными фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [5]. Вычислен коэффициент увеличения эффективной электронной массы m^*/m , значения которого для каждой $3d$ орбитали Fe представлены в

таблице. При этом, усреднённое для d -состояний значение коэффициента, составляющее 3.03, хорошо согласуется со значением 3.01 перенормировочного фактора, полученного из сравнения результатов расчёта в рамках теории функционала плотности с экспериментальными спектрами ARPES и представленного в работе [5].

	d_{xy}	$d_{yz,xz}$	$d_{3z^2-r^2}$	$d_{x^2-y^2}$
m^*/m	2.01	3.32	2.41	4.09

Данная работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект РФФИ № 12-02-91371-СТ_a), а так же Фонда некоммерческих программ «Династия».

1. Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano et al., J. Am. Chem. Soc. **128**, 10012 (2006)
2. V.I. Anisimov, A.I. Poteryaev, M.A. Korotin et al., J. Phys.: Condens. Matter **9**, 7359 (1997)
3. K. Held, I.A. Nekrasov, G. Keller et al., Phys. Status Solidi B **243**, 2599 (2006)
4. V.I. Anisimov, D.E. Kondakov, A.V. Kozhevnikov et al., Phys. Rev. B **71**, 125119 (2005)
5. S.V. Borisenko, V.B. Zabolotnyy, D.V. Evtushinsky et al., Phys. Rev. Lett. **105**, 067002 (2010)

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ И ТРАНСПОРТА
В РЕЛАКСИРОВАННЫХ Si/SiGe ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Орлов Л.К.^{1,2}, Ивина Н.Л.³, Орлов М.Л.^{1,2*}, Пименов И.В.¹, Мельникова А.А.²,
Ковалевский К.А.¹, Еремичев С.С.²

¹Институт физики микроструктур РАН, г. Нижний Новгород, Россия

²Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

³Нижегородский институт управления – филиал РАНХиГС, г. Нижний Новгород, Россия

*E-mail: orlovm@ipmras.ru

Повышение уровня легирования Si/Si_{1-x}Ge_x транзисторных гетерокомпозиций приводит к появлению особенностей в поведении транспортных характеристик этих структур, связанных как с проявлением фундаментальных свойств двумерного металла [1], так и с довольно заметным влиянием заряда свободных носителей на форму потенциала квантовой ямы и прилегающих к ней барьерных слоёв. Последнее обстоятельство явилось основным побуждающим фактором для выполнения настоящей работы.

В работе рассмотрены низкотемпературные электрические и магнетотранспортные характеристики частично релаксированных Si/Si_{1-x}Ge_x гетероструктур с двумерным электронным каналом проводимости в упруго напряжённом слое кремния нанометровой толщины. Проведён детальный расчёт потенциала, характера распределения электронов по слоям структуры, туннельной прозрачности возникающего барьера.

При моделировании использовались параметры реальных образцов с двумерным кремниевым транспортным каналом толщиной около 10 нм, которые характеризовались значением поверхностной концентрации носителей, превышающей величину $n_{cr} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, и относительно невысокими значениями подвижности ($\mu_e \approx 3000 \div 5000 \text{ cm}^2/Vs$ при температуре жидкого гелия) транспортных электронов в системе [2].

Для образцов с различным характером упругой деформации в слоях и разным уровнем их легирования на базе уравнения Пуассона и уравнений квазигидродинамики проведён численный анализ потенциала и характера распределения электронов по слоям структуры. Найдена зависимость формы потенциального барьера, формируемого в окрестности гетероперехода, и характеристик формируемой в слое кремния квантовой ямы от параметров системы, включающих уровень легирования слоёв, их состав и ширину квантовой ямы.

Для моделируемых структур показано, что электроны локализуются в окрестности только верхней границы ямы и их концентрация может существенно превышать средний уровень легирования верхнего барьерного слоя. Узость формируемого на гетерогранице барьера может приводить к межслоевым туннельным переходам даже в нерезонансных условиях, особенно, если в окрестности гетероперехода возникают локальные состояния, которые могут привести к резонансно-туннельному проколу структуры поперёк плоскости ее слоёв в меньших полях. Подобная возможность, на примере наблюдаемых закономерностей выходных характеристик InGaAs/InAlAs транзисторной структуры, впервые обсуждалась в работе [3]. Данный механизм может проявляться и в кремниевых структурах транзисторного типа, особенно при изучении протекания тока поперёк плоскости слоёв структуры [4].

Работа выполнялась при финансовой поддержке РФФИ проект 12-02-31291, федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы, заявки 2011-1.4-509-009-006 и 2012-1.3.1-12-000-2003-031.

1. Olshanetsky E.B., Renard V., et.al., Phys. Rev. B., **68**, 085304 (2003)
2. Орлов Л.К., Horwath Z.J., Лончаков А.Т. и др., ФТТ, **50**, 317 (2008)
3. Орлов М.Л., Орлов Л.К., ФТП, **43**, 679 (2009)
4. Орлов Л.К., Horvatz J.Z., Потапов А.В. и др., ФТТ, **46**, 2069 (2004)

ПОПЕРЕЧНЫЕ ПОЛЕВЫЕ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ХОЛЛА В ЭЛЕКТРОННО-ЛЕГИРОВАННЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4+\delta}$ Петухов Д.С.^{1*}, Чарикова Т.Б.¹, Неверов В.Н.¹, Петухова О.Е.¹, Иванов А.А.²¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия²Московский государственный инженерно-физический институт, г. Москва, Россия

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

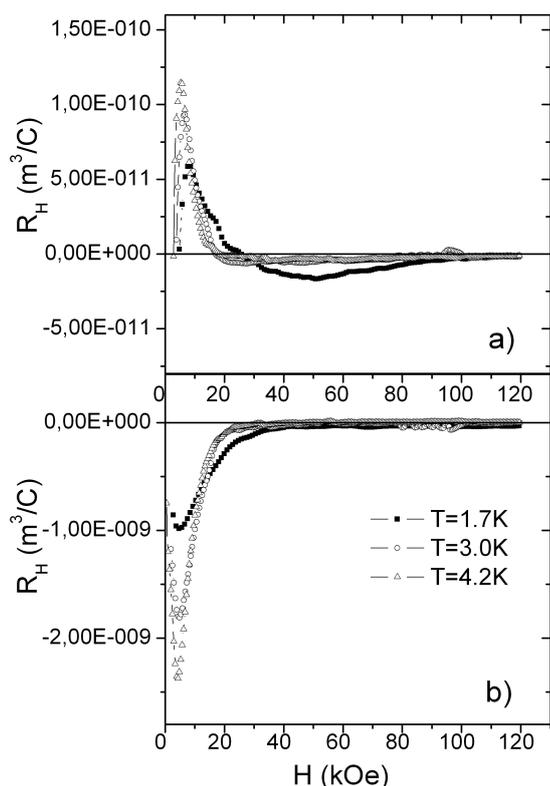


Рис. 1. Зависимость $R_H(H)$ для образца $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4+\delta}$ при различных температурах: а – ось c направлена перпендикулярно току, б – ось c направлена вдоль тока.

В области магнитных полей от 0 до 20 кЭ коэффициент Холла по абсолютной величине также имел максимум (рисунок 1б), величина которого росла с увеличением температуры.

Работа выполнена по плану РАН, проект № 12-П-2-1018, при частичной поддержке РФФИ, проект № 12-02-00202.

1. Чарикова Т.Б., Пономарев А.И., Харус Г.И. и др., ЖЭТФ, **132**, 712 (2007)

Целью работы было изучить зависимости коэффициента Холла от магнитного поля $R_H(H)$ в монокристаллических плёнках электронно-легированных сверхпроводников $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4+\delta}$ с плоскостью ориентации (110). Параметры образцов и способ их получения приведены в статье [1].

В экспериментах были исследованы образцы $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4+\delta}$, отожжённые при температуре 780°C. В первом образце ось c была расположена в направлении перпендикулярном направлению тока, во втором образце ось c была направлена вдоль направления протекания тока. Измерения эффекта Холла были проведены на установке «Oxford Instruments» (ИФМ УрО РАН) в магнитных полях до 120 кЭ при температурах 1.7, 3.0 и 4.2 К.

Для первого образца коэффициент Холла для всех температур в магнитном поле 120 кЭ имел величину $-1.5 \cdot 10^{-12}$ м³/Кл и практически не менялся при уменьшении магнитного поля до 80 кЭ (рисунок 1а). При дальнейшем уменьшении магнитного поля коэффициент Холла менял знак на положительный, достигал максимума, а затем становился равным нулю в поле меньше 5 кЭ. Величина максимума коэффициента Холла росла с увеличением температуры. Для второго образца коэффициент Холла в нормальном состоянии был практически равен нулю и при уменьшении магнитного поля не менял знак, в отличие от первого образца.

**ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ВЕРХНЕГО КРИТИЧЕСКОГО ПОЛЯ В
ЭЛЕКТРОННОМ СВЕРХПРОВОДНИКЕ $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$
С ОРИЕНТАЦИЕЙ (110) И (001)**

Петухова О.Е.^{1*}, Чарикова Т.Б.¹, Петухов Д.С.¹, Иванов А.А.²

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Московский государственный инженерно-физический институт, г. Москва, Россия

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

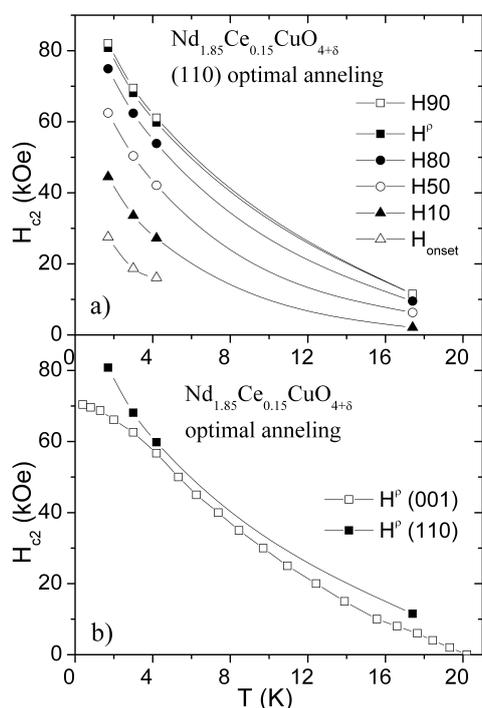


Рис. 1. а) Температурные зависимости H_{10} , H_{50} , H_{80} , H_{90} , H_{onset} , H_{c2}^p для сверхпроводника $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4+\delta}$ с ориентацией (110);

б) Температурные зависимости H_{c2}^p для сверхпроводника $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4+\delta}$ с ориентацией (110) и (001).

$H_{c2}^p(T)$ для образца с ориентацией (001) имеют отрицательную кривизну в области низких температур и положительную при $T \rightarrow T_c$ (рисунок 1б).

Работа выполнена по плану РАН, проект № 12-П-2-1018, при частичной поддержке РФФИ, проект № 12-02-00202.

1. Петухова О.Е. и др., Сборник тезисов докладов конференции СПФКС-12, 14-20 ноября, 76 (2011)

Поведение верхнего критического поля при изменении температуры в высокотемпературных электронных сверхпроводниках остаётся актуальной задачей физики конденсированного состояния. В данной работе исследованы температурные зависимости верхнего критического поля в электронно-легированных сверхпроводниках $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ с ориентацией (001) (плоскость ab параллельна плоскости подложки) и с ориентацией (110) (ось c параллельна плоскости подложки).

Проведены измерения полевых зависимостей удельного сопротивления для монокристаллических плёнок $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ с содержанием церия $x=0.15$ и $\delta \rightarrow 0$ в интервале температур (1.7 - 20) К и в магнитных полях до 120 кЭ. В результате измерений $\rho(H)$ получены зависимости магнитных полей H_{10} , H_{50} , H_{80} , H_{90} , H_{onset} , H_{c2}^p от температуры (рисунок 1а). Где H_{onset} – поле, при котором удельное сопротивление становится равным нулю, H_{c2}^p – поле, полученное из пересечения касательных проведённых к области сопротивления нормального состояния и к области перехода, а H_{10} , H_{50} , H_{80} , H_{90} – поля, найденные соответственно на уровне 10, 50, 80 и 90% от максимальной величины сопротивления.

Установлено, что все зависимости $H_{c2}(T)$ для плёнки с ориентацией (110) обладают положительной кривизной и аналогичны зависимостям $H_{c2}(T)$ для образца с ориентацией (001) (см. [1]). Однако температурные зависимости верхнего критического поля

ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В ТЕРАГЕРЦОВЫХ СМЕСИТЕЛЯХ НА ОСНОВЕ ДВУМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СИСТЕМ

Шангина Е.Л.

Институт физики высоких давлений РАН, г. Москва, Россия

E-mail: shangina@hppi.troitsk.ru

Одной из актуальных проблем современной радиофизики является получение изображений в терагерцовом диапазоне частот. В этом диапазоне наилучшими характеристиками, в том числе шумовой температурой, обладают охлаждаемые до гелиевых температур СИС-детекторы и смесители (боллометры) на горячих электронах [1]. Широко распространено применение смесителей на сверхпроводниковых наноструктурах NbN, при этом в качестве гетеродинного источника работают квантовые каскадные лазеры [2,3]. Такие комплексы для гетеродинного детектирования характеризуются низкой шумовой температурой ~ 800 К, низкой мощностью гетеродина (до 6 мВт) и широкой полосой преобразования >6 ТГц.

В качестве альтернативы смесителям на горячих электронах в сверхпроводниках предложены гетеродинные смесители с фоновым каналом охлаждения носителей на основе наноструктур с двумерным электронным газом AlGaAs/GaAs [4]. Полоса преобразования таких смесителей определяется при гелиевых (азотных) температурах релаксацией носителей на акустических (оптических) фонах соответственно. Целью настоящей работы является теоретическое исследование механизмов энергетической релаксации и параметрических зависимостей времён энергетической релаксации электронов в двумерных полупроводниковых структурах, а также поиск оптимального решения для полосы преобразования и потерь преобразования смесителей с фоновым каналом охлаждения электронов на основе полупроводниковых наноструктур AlGaAs/GaAs.

Результаты расчётов показывают, что доминирующим механизмом низкотемпературной ($T = 1.5 - 4$ К) неупругой релаксации электронов в гетероструктурах AlGaAs/GaAs является малоугловое рассеяние на пьезоакустических фонах [5]. При этом предельная подвижность в AlGaAs/GaAs гетероструктуре с концентрацией электронов $n_s = 4.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ при $T=1.6$ К составляет $110 \times 10^6 \text{ см}^2/V \cdot \text{с}$, увеличение концентрации $n_s = 8.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ приводит к возрастанию подвижности до значений $320 \times 10^6 \text{ см}^2/V \cdot \text{с}$.

Для длинных ($l > 1$ мкм) мостиков в охлаждении преобладает фоновый канал. При этом в образцах с высокой подвижностью μ ($\sim 3 \cdot 10^5 \text{ см}^2/V \cdot \text{с}$ при $T=77$ К) и концентрацией двумерных носителей $\sim 4.2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ для AlGaAs/GaAs смесителя ожидается полоса потерь преобразования ~ 0.04 ТГц, что соответствует времени остывания 4 нс. Это значение сопоставимо с рекордными характеристиками сверхпроводниковых смесителей и позволяет рассматривать AlGaAs/GaAs смесители с двумерным электронным газом как перспективную основу одиночных и матричных фотоприёмников терагерцового диапазона массового производства.

1. Gundlach K. H. and Schicke M. A., Supercond. Sci. Technol., **13**, R171 (2000)
2. Richter H. et al., Appl. Phys. Lett., **93**, 141108 (2008)
3. Khosropanah P. et al., J. Appl. Phys., **104**, 113106 (2008)
4. Lee M. et al., Appl. Phys. Lett., **78**, 2888 (2001)
5. Shangina E.L., Semicond. Sci. Technol., **27**, 105021 (2012)

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ МАГНИТНЫХ НАНООСТРОВОВ

Пудонин Ф.А., Шерстнев И.А.*, Болтаев А.П.

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия

*E-mail: igor.sherstnev@gmail.com

Структуры пониженной размерности, в частности, сверхтонкие плёнки, являются объектами непрерывных научных изысканий уже на протяжении последних 20 лет. В этой связи, важным становится вопрос о так называемом перколяционном переходе, то есть переходе плёнок от прерывистой к сплошной структуре. Для металлических образцов этот переход становится особенно важным, так как при переходе меняется характер их проводимости; фактически, это есть переход от диэлектрической к металлической проводимости.

В данной работе исследовалось несколько наборов тонких металлических (пермаллоевых) плёнок, эффективные толщины которых варьировались от 4 до 31,2 Å. Структуры были выращены методом RF-распыления на подложках из ситалла. Сами плёнки представляли собой систему разупорядоченных островов. Подробности изготовления таких структур приведены в [1]. Для нахождения эффективной толщины плёнок, при которой происходит переход диэлектрик-металл, было проведено две серии экспериментов. Первая серия включала эллипсометрическое исследование представленных образцов. Из данных эллипсометрии была вычислена диэлектрическая проницаемость структур. Вторая серия экспериментов состояла из измерений проводимости плёнок при разных температурах. В результате была обнаружена точка перехода диэлектрик-металл. Толщина перехода совпала для результатов, полученных как из оптических (эллипсометрия), так и из электрических измерений.

Ранее [2] в подобных структурах была обнаружена интересная особенность — нелинейная проводимость, то есть зависимость проводимости от приложенного внешнего напряжения. Были проведены измерения для исследования этой особенности в данных структурах. Нелинейная проводимость была обнаружена и её величина достигала нескольких процентов. Важно отметить, что проводимость имела нелинейный характер у образцов вблизи найденной точки (толщины) перехода.

1. А.П. Болтаев, Н.А. Пенин, А.О. Погосов, Ф.А. Пудонин, Активационная проводимость в островковых металлических плёнках, ЖЭТФ, **126** (4), 827-833 (2004)
2. А.П. Болтаев, Ф.А. Пудонин, Влияние слабого электрического поля на проводимость в тонких металлических плёнках, ЖЭТФ, **130** (3), 500-505 (2006)

Оптика и спектроскопия

Оптика и спектроскопия

~ o ~

СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ И КРУГОВОГО ДИХРОИЗМА КРИСТАЛЛОВ $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, ЛЕГИРОВАННЫХ ИОНАМИ КОБАЛЬТА

Алябьева Л.Н.* , Бурков В.И.

Московский физико-технический институт, г. Москва, Россия

*E-mail: selena@mail.mipt.ru

В настоящей работе исследованы спектры поглощения (СП) и кругового дихроизма (КД), легированных кобальтом кристаллов $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ (LGS) с целью определения валентного состояния и положения в кристаллической решётке примесных ионов. Исследованные кристаллы обладают разупорядоченной структурой, что приводит к сильному уширению линий поглощения. Наличие такого свойства делает эти кристаллы перспективным материалом для производства лазеров с перестраиваемой частотой, что является актуальным на сегодняшний день направлением в лазерной оптике. Помимо этого благодаря уширению структуры, представители семейства лангаситов обладают рекордными пьезокоэффициентами, и использование их может позволить удовлетворить потребности современной акустоэлектроники. Тем не менее, в настоящее время лангаситы, легированные ионами переходных металлов довольно мало изучены. Все вышесказанное в совокупности делает данные кристаллы весьма интересными для исследования, а изучение их свойств важной задачей спектроскопии.

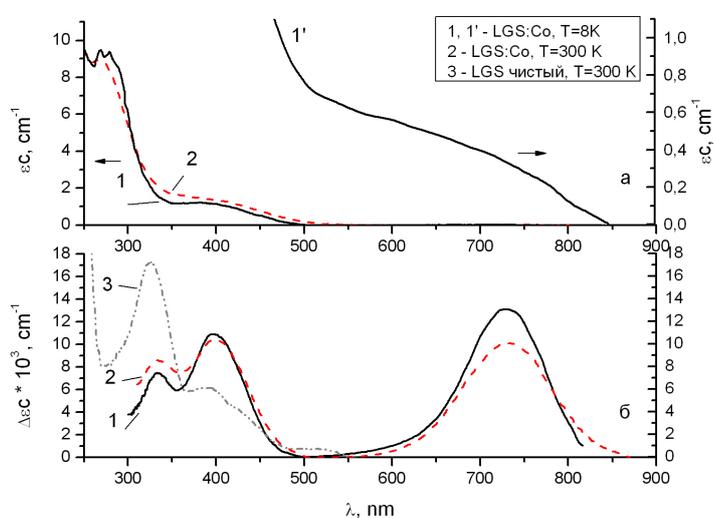


Рис. 1. СП (а) и КД (б) кристалла $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}:\text{Co}$ и чистого $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$.

Если сопоставить полученные данные с СП и КД нелегированного кристалла лангасита [1] (рис. 1), то легко выделить полосы, которые относятся к переходам примесных ионов кобальта. В оксидных соединениях кобальт обычно присутствует в степенях окисления 2+ или 3+ [2]. Анализ спектров показал, что полоса при $\lambda = 733$ нм соответствует переходу ${}^4A_2 \rightarrow {}^4T_1(P)$, а в ближней ИК-области спектра лежат две полосы, связанные с ${}^4A_2 \rightarrow {}^4T_1(F)$ переходом, соответствующим тетраэдрической координации Co^{2+} . Таким образом, в кристалле LGS примесные ионы кобальта при легировании входят в тетраэдрические позиции в степени окисления 2+, замещая ионы Ga^{3+} .

Авторы благодарны Миллю Б.В. и центру коллективного пользования МФТИ.

1. Бурков В.И., Передерей Е.В. и др., Кристаллография, **53**, 892 (2008)
2. Ливер Э., Электронная спектроскопия неорганических соединений, Мир, (1987)

ВОЗБУЖДЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛАЗМОНОВ-ПОЛЯРИТОНОВ В ДЕФОРМИРОВАННЫХ ОДНОМОДОВЫХ ВОЛОКОННЫХ СВЕТОВОДАХ

Дышлюк А.В.

Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток, Россия.
Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, г. Владивосток, Россия
E-mail: anton_dys@iacp.dvo.ru

Одним из магистральных направлений развития биосенсорики на сегодняшний день являются оптические датчики на основе поверхностного плазмонного резонанса (ППР). Благодаря высокой чувствительности и отсутствию необходимости использования флуоресцентных маркеров ППР-сенсоры стали главным инструментом в исследованиях биомолекулярных взаимодействий и получили широкое применение для детектирования химических и биологических аналитов [1]. ППР-сенсоры используют плазмонные колебания, распространяющиеся вдоль границы раздела металл/диэлектрик, для измерения малых вариаций показателя преломления диэлектрической среды вблизи границы раздела с разрешением до 10^{-7} единиц показателя преломления (ЕПП). Наиболее распространённой схемой построения ППР-сенсора является конфигурация Кречмана, использующая призму, в которой плазмонный резонанс возбуждается пучком света, падающим под определённым углом изнутри призмы на покрытую металлической плёнкой грань. Известна и другая схема построения ППР-сенсоров, в которой плазмонный резонанс возбуждается в металлической плёнке, нанесённой на поверхность волоконного световода (ВС). Такие датчики в отличие от ППР-сенсоров, выполненных по схеме Кречмана, имеют варьруемую длину измерительной базы, не требуют юстировки оптических элементов, а также обеспечивают возможность миниатюризации и проведения удалённых измерений [2]. Волоконно-оптические ППР-сенсоры, как правило, выполняются на многомодовых (ММ) ВС с полимерной оболочкой или на кварц/кварцевых одномодовых (ОМ) световодах. Однако в ММ световодах возникают модовая и поляризационная конверсии, что в значительной степени снижают метрологические характеристики датчиков [1]. При использовании же одномодовых ВС приходится прибегать к полировке или химическому травлению части оптической оболочки световода, что снижает механическую стабильность, долговечность и надёжность датчика.

В настоящей работе предлагается новый способ возбуждения поверхностного плазмонного резонанса без нарушения структурной целостности кварц/кварцевого ОМ ВС. Взаимодействие распространяющейся по сердцевине фундаментальной моды с нанесённой на поверхность оболочки ВС металлической плёнкой реализуется опосредовано, через моды шепчущей галереи, локализованные вблизи поверхности оболочки изогнутого ВС и проникающие во внешнюю среду в виде эванесцентного поля. Это поле может возбудить ППР в металлическом покрытии оболочки, если обеспечить совпадение постоянных распространения МШГ и поверхностного плазмона. Обнаружить это явление можно по результату взаимодействия МШГ и направляемой по сердцевине ВС фундаментальной моды. Однако условия возбуждения и обнаружения ППР предлагаемым способом существенно отличаются от стандартных условий, реализуемых, например, в схеме Кречмана. Исследованию данных условий, а также обсуждению возможности создания прецизионных рефрактометрических сенсоров нового типа и посвящена настоящая работа.

1. J. Homola, Surface Plasmon Resonance Based Sensors, Springer Series on Chemical Sensors and Biosensors (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 2006)
2. B.D. Gupta and R.K. Verma, Surface plasmon resonance-based fiber optic sensors: principle, probe designs, and some applications, J. Sensors, **1** (2009)

ПЕРЕХОД ДИЭЛЕКТРИК-МЕТАЛЛ В LaFeO_3

Ефремов А.В.*, Лукоянов А.В., Скорняков С.Л.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Уже довольно много лет переход диэлектрик-металл в соединениях d - и f -элементов [1] является одним из самых исследуемых явлений в физике конденсированного состояния вещества. В частности, было исследовано огромное число оксидов переходных металлов, в которых наблюдаются переходы под давлением из диэлектрического моттовского состояния с широкой запрещённой зоной в металлическое состояние. В таких оксидах, как MnO [2] и Fe_2O_3 [3], переход изолятор-металл происходит вместе с переходом из высокоспинового в низкоспиновое состояние, в то же время магнитный момент изменяется с $4 \mu_B$ до $1 \mu_B$. С другой стороны, в оксиде FeO не обнаружено такого сильного изменения магнитного момента [4], однако в этом соединении происходит переход в металлическое состояние под действием давления.

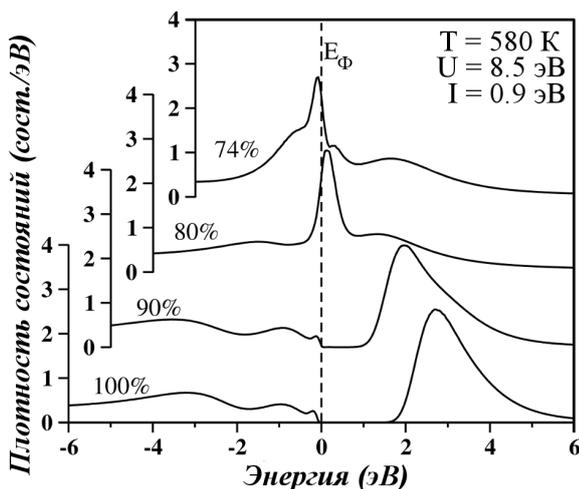


Рис. 1. Полная плотность состояний для LaFeO_3 в приближении LDA+DMFT.

для правильного описания многоэлектронных эффектов.

В данной работе в рамках подхода LDA+DMFT был выполнен расчёт для ряда объёмов элементарной ячейки LaFeO_3 с учётом орторомбического искажения кристаллической решётки. Плотность состояний для четырёх различных объёмов элементарной ячейки LaFeO_3 показана на рисунке 1. Из результатов расчётов следует, что переход диэлектрик-металл происходит при изменении объёма от 90% до 80%, а магнитный момент уменьшается с $4.5 \mu_B$ до $1.5 \mu_B$, соответственно, что полностью согласуется с экспериментальными данными [5].

В работе [5] был обнаружен переход диэлектрик-металл для соединения LaFeO_3 под давлением. Этот переход происходит при давлении около 30 ГПа, что соответствует уменьшению объёма элементарной ячейки LaFeO_3 до 84% от равновесного объёма при нормальном давлении.

Для описания перехода диэлектрик-металл в этих соединениях можно воспользоваться методом LDA+DMFT [6], который представляет собой комбинацию приближения локальной электронной плотности (LDA) и теории динамического среднего поля (DMFT). В целом, метод LDA+DMFT включает в себя результаты самосогласованного расчёта в рамках LDA и решения примесной модели Андерсона в рамках метода DMFT, который учитывает электронные корреляции в частично заполненной оболочке переходного металла, что является очень важным

1. Imada M., Fujimori A., and Tokura Y., Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998)
2. Kunes J., Lukoyanov A. V., Anisimov V. I. et al., Nature Materials **7**, 198 (2008)
3. Kunes J., Korotin Dm. M., Korotin M. A. et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 146402 (2009)
4. Shorikov A. O. et al., Phys. Rev. B. **82**, 195101 (2010)
5. Xu W. M. et al., Phys. Rev. B. **64**, 094411 (2001)
6. Held K., Nekrasov I. A., Keller G. et al., Phys. Stat. Sol. (b) **243**, 2599 (2006)

ЭФФЕКТ МАГНИТОПРОПУСКАНИЯ СВЕТА В КОМПОЗИТАХ НА ОСНОВЕ ЛЕГИРОВАННЫХ МАНГАНИТОВ

Железнякова А.А.², Телегин С.В.^{1,2}, Телегин А.В.^{1*}, Мостовщикова Е.В.¹

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

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

Манганиты $(\text{Nd, La})_{1-x}(\text{Ca, Sr})_x\text{MnO}_3$, обладающие эффектом колоссального магнитосопротивления, относятся к перспективным функциональным материалам для создания магнитооптических устройств в связи с обнаружением в них гигантских эффектов магнитопротекания (МП) и магнитоотражения естественного света в инфракрасной (ИК) области спектра [1,2]. Эффект МП заключается в уменьшении интенсивности света, прошедшего через образец, при приложении магнитного поля в узком температурном интервале вблизи температуры Кюри (T_C) манганита. Возможность практического использования магнитооптических элементов на основе манганитов ограничивается необходимостью их термостабилизации вблизи T_C , увеличения прозрачности при сохранении величины МП и упрощения технологии их получения.

В настоящей работе были проведены исследования оптических свойств композитов из смеси порошка манганита и порошка CsJ, взятых в различных соотношениях и спрессованных под давлением 0.9 ГПа. Исходные кристаллы манганитов были получены методом твёрдофазного синтеза в лаборатории магнитных полупроводников ИФМ, а порошки — путём размола вручную или в шаровой мельнице.

Было показано, что оптические свойства композитов в ИК-диапазоне близки к свойствам плёнок такого же состава. После подбора оптимального весового соотношения компонентов (2:400) в исследуемых композитах впервые был обнаружен эффект МП с максимумом при $T = T_C$, сравнимый по величине с МП, полученным ранее в тонких плёнках такого же состава. Температурные, спектральные и полевые зависимости МП в композитах идентичны зависимостям для плёнок. Для манганитов с зарядовым упорядочением, в частности для $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$, обнаружено, что уменьшение размеров зерна порошка манганита до наномасштаба ($d \leq 100$ нм) приводит к появлению дополнительного низкотемпературного МП и существенному расширению температурного интервала эффекта, что связано с особенностями магнитного состояния нанопорошка $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$.

Учитывая, что прозрачность композитов близка к прозрачности тонких плёнок, величина МП для композитов и плёнок сопоставима, технология получения композитов более проста, то композиты на основе порошков манганитов в прозрачной матрице могут быть рассмотрены как новые магнитооптические материалы ИК-диапазона спектра.

Работа выполнена при поддержке проектов ОФН РАН, РФФИ 10-02-00038, 11-02-00252, 12-02-31505 мол_а.

1. Сухоруков Ю.П., Телегин А.В. и др., ЖЭТФ, **140**, 6 (2012)

2. Грановский А.Б., Сухоруков Ю.П., Телегин А.В. и др., ЖЭТФ, **139**, 1 (2011)

ИЗМЕРЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВОДОРОДА В ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ ВТ1-0 МЕТОДОМ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА

Залогина А.С.*, Николаева А.Н., Пушилина Н.С., Лидер А.М.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

*E-mail: anast.zalogina@gmail.com

Актуальность изучения такого элемента, как водород, возрастает с каждым днём, так как водород считается экологически безопасным источником энергии, имеет высокую теплопроводность, низкую вязкость, что немаловажно для его транспортировки [1]. Водород в металлах приводит к изменению магнитных, электрических, тепловых и других физических свойств твёрдого тела [2]. При этом весьма небольшие содержания водорода в металлах и сплавах могут приводить к неисправимым дефектам, к снижению пластичности изделий и т.д.

Оптическая спектроскопия высокочастотного тлеющего разряда – метод элементного и послойного анализа, основанный на контролируемом распылении атомов с поверхности образца под воздействием ионов аргона, бомбардирующих площадь диаметром несколько миллиметров [3]. Данный метод реализован в приборе Profiler2 фирмы Hologiba. Высокое качество анализа распределения водорода в металлах зависит от выбора оптимальных операционных параметров. Целью данной работы является разработка методики для исследования распределения водорода в титановом сплаве ВТ1-0 методом оптической спектроскопии высокочастотного тлеющего разряда.

Оптимизация параметров эксперимента была проведена путём изменения мощности разряда в диапазоне от 20 - 45 Вт и давления газа от 400 - 700 Па. В результате исследований было обнаружено, что давление практически не влияет на глубину кратера, который образуется в результате распыления поверхности образца. Однако давление газа является важным параметром, от которого зависит форма кратера. Как известно, дно кратера должно быть плоским, поскольку в этом случае достигается постоянство скорости распыления по всей анализируемой области. Установлено, что для фиксированной мощности разряда скорость распыления в тлеющем разряде постоянного тока практически не зависит от давления рабочего газа. Таким образом, для исследования методом оптической спектроскопии высокочастотного тлеющего разряда системы титан-водород оптимальными параметрами являются: давление в диапазоне от 400 до 550 Па и мощность от 20 до 30 Вт.

1. Шпильрайн Э.Э., Малышенко С.П., Кулешов Г.Г., Энергоатомиздат, (1984)
2. Сливак Л.В. Международный журнал экспериментального образования, **12**, 63, (2011)
3. Шапон П. // Аналитика и контроль, **11**, №1, 47, (2007)

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ ФОТОХРОМНЫХ (*E*)-2-СТИРИЛХИНАЗОЛИН-4(*ZH*)-ОНОВ

Ким Г.А.^{1*}, Овчинникова И.Г.¹, Носова Э.В.², Русинов Г.Л.¹

¹)Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²) Химико-технологический институт Уральского федерального университета им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: kim-g@ios.uran.ru

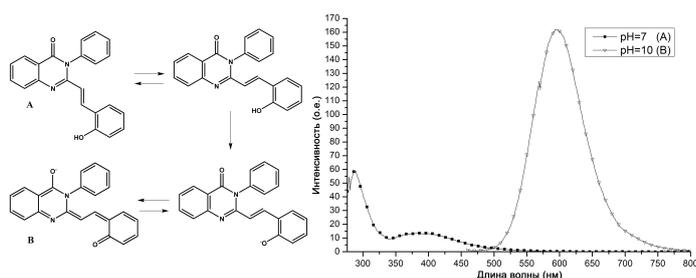


Рис. 1. Структурные свойства конформеров (А) и таутомеров (В) гидроксизамещённых аналогов арилвинилхиназолин-4(*ZH*)-онов и спектр их флуоресценции в нейтральной и щелочной средах.

Полифункциональные светочувствительные гетероциклические аналоги стильбена являются важными структурными элементами в современных органических материалах, используемых в различных оптических приборах и технологиях, включая светодиоды, солнечные батареи, полевые транзисторы и нелинейную оптику. Недавно синтезированные новые представители среди (*E*)-2-стирилхиназолин-4(*ZH*)-онов демонстрируют заметную флуоресценцию, которую можно настраивать введением определённых

функциональных групп в их гомологическом ряду [1,2]. Среди них гидроксипроизводные диазины (структура одного из гомологов представлена на рисунке), подобно мероцианиновым красителям, могут представлять интерес для создания двух и четырёхтактных молекулярных переключателей с управляемыми люминесцентными свойствами [3].

Проведены сравнительные исследования по изменению фотофизических (оптическая плотность, флуоресценция) и фотохимических (*E* – *Z* фотоизомеризация) свойств среди арилвинилхиназолин-4(*ZH*)-онов и их гидроксизамещённых аналогов. Эксперименты проводились с использованием двулучевого спектрофотометра UV 2401 PC («Shimadzu», Япония) и спектрофлуориметра «Varian Cary Eclipse». Обнаружено влияние структуры, функциональных групп соединений и природы растворителя на процессы тушения. Выявлена существенная роль pH среды в изменении люминесцентных свойств соединений (рисунок 1). В частности, введение гидроксигрупп в фенильную или нафтильную группу в основной среде снимает тушение люминесценции. Установлены закономерности в изменении скорости фотоиндуцируемого процесса *E*–*Z* изомеризации и интенсивности люминесценции от структуры, конфигурации (*E*)-2-стирилхиназолин-4(*ZH*)-онов. Определены способы управления интенсивностью и длиной волны люминесценции этих фотохромных систем в растворах.

Эта работа поддерживается РФФИ (грант 11-03-00718) и Государственной программой поддержки ведущих научных школ (грант № НШ-5505.2012.3).

1. Trashakhova T.V., Nosova E.V., Valova M.S., Slepukhin P.A., Lipunova G.N. and Charushin V.N., Russian Journal of Organic Chemistry, **5**, 47, (2011)
2. Nosova E.V., Stupina T.V., Lipunova G.N., Valova M.S., Slepukhin P.A., Charushin V.N., International Journal of Organic Chemistry, **2** (2012)
3. Norris W. Tyer, Jr., and Ralph S. Becker, Journal of the American Chemical Society, **92**:5 (1970)

КОМБИНИРОВАННЫЕ РЕНТГЕНОВСКИЕ ФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ И РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЗАРЯДОВОГО СОСТОЯНИЯ СЛОИСТЫХ ДИСУЛЬФИДОВ ХРОМА-МЕДИ

Корогаев Е.В.^{1*}, Перегудова Н.Н.¹, Пичугин А.Ю.¹, Быков Р.В.², Сыроквашин М.М.³,
Морозов Н.И.³, Сотников А.В.³

¹)Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

²)Новосибирский государственный технический университет, г. Новосибирск, Россия

³)Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Россия

*E-mail: korotaev@niic.nsc.ru

Неорганические соединения переходных металлов являются перспективной многофункциональной базой для современной электроники. Одним из представителей данного класса соединений являются слоистые дисульфиды хрома-меди $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x = 0 \div 0.4$), привлекающие внимание исследователей своими магниторезистивными свойствами. Модель возникновения колоссального магнетосопротивления данных соединений основывается на возможности сосуществования в них двух зарядовых/магнитных состояний $\text{Cu}^+\text{Cr}^{3+}\text{S}_2^{2-}$ ($S_{tot} = 3/2$) и $\text{Cu}^{2+}\text{Cr}^{2+}\text{S}_2^{2-}$ ($S_{tot} = 5/2$), соотношение между которыми меняется в зависимости от содержания ванадия [1].

Возможность сосуществования зарядовых состояний делает целесообразным проведение исследований данных соединений методами рентгеновской фотоэлектронной и рентгеновской эмиссионной спектроскопии, поскольку положение энергетических уровней и расстояние между уровнями зависят от зарядового состояния соответствующих атомов. Для соединений переходных элементов вследствие наличия неспаренных $3d$ - электронов происходят изменения в структуре рентгеновских фотоэлектронных и эмиссионных линий: происходит мультиплетное расщепление соответствующих линий, а также проявление спутанных структур, обусловленных процессами переноса заряда (СТ-модель [2,3]).

Нами были проведены исследования основных рентгеновских фотоэлектронных $2p$ - линий, а также рентгеновских эмиссионных $K\alpha_{1,2}$ -линий (переход $2p \rightarrow 1s$) меди, хрома, серы, входящих в состав слоистых дисульфидов хрома-меди в виде порошков, компактов и монокристаллов. Для соответствующих линий было показано существенное различие рентгеновских фотоэлектронных $2p$ -, $3s$ -линий монокристаллических и порошковых образцов. Сопоставление данного результата с результатами исследования соответствующих $K\alpha_{1-2}$ -линий позволило, основываясь на оценках толщины слоя половинного ослабления линий меди, хрома, серы сделать вывод о том, что зарядовое состояние соответствующих атомов на поверхности и в глубине исследуемых образцов различаются, а также оценить толщину поверхностного изменённого слоя вещества.

В результате проведённых исследований можно заключить, что в приповерхностных слоях порошковых $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x = 0 \div 0.4$) имеется значительное количество атомов меди, обладающих магнитными моментами (конфигурация $3d^9$). Соответствующие атомы потенциально могут вносить дополнительный вклад в член электросопротивления, обусловленный процессами рассеяния электронов различной спиновой ориентации на «магнитной структуре» исследуемых веществ, тем самым усиливая магниторезистивные свойства порошковых дисульфидов хрома-меди.

Исследования проводятся при поддержке гранта РФФИ №12-02-31589 мол_а.

1. Abramova G.M., Petrakovsky G.A., Low Temperature Physics, **32**, 954 (2006)
2. Larsson S., Journal of electron spectroscopy and related phenomena, **8**, 171 (1976)
3. Нефедов В.И., Рентгеноэлектронная спектроскопия химических соединений, Химия (1984)

РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ТИАКАЛИКСАРЕНОВ

Лаврухина С.А., Федоренко А.Д., Семушкина Г.И., Коротаев Е.В., Крючкова Н.А.,
Мазалов Л.Н., Торгов В.Г., Костин Г.А.

ИНХ СО РАН, г. Новосибирск, Россия

E-mail: otmutiugeotmutil@mail.ru

В последнее время изучению каликсаренов уделяют большое внимание. Каликсарены в настоящее время используются в качестве экстрагентов в технологических процессах при обработке радиоактивных материалов. Молекулы каликсаренов входят в состав химических сенсоров и широко используются в биохимических и медицинских исследованиях. Также каликсарены являются удобной макроциклической платформой для направленного синтеза комплексов переходных металлов.

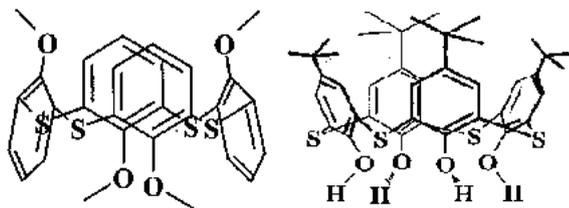


Рис. 1. Молекулы каликсаренов в конформации альтернат (слева) и конус (справа).

В настоящем исследовании основное внимание уделяется изучению характера участия атомов кислорода, входящих в состав верхнего и нижнего ободов молекул в построении занятых молекулярных орбиталей, обуславливающих реакционные свойства, соответствующих молекул. С этой целью были изучены рентгено-электронные $1s$ -спектры и рентгеновские эмиссионные $K_{\alpha 1,2}$ -спектры кислорода в молекулах каликсаренов различного строения. Соответствующие спектры были получены в молекулах-

альтернатах и молекулах-конусах (рис.1). Для получения полной картины электронной структуры данных молекул также были изучены рентгеноэлектронные $2p$ спектры и K_{β} эмиссионные спектры серы, $1s$ и $K_{\alpha 1,2}$ азота, $2p$ и K_{β} фосфора. Теоретические расчёты были выполнены при помощи программного комплекса Jaguar 6.5 Shrodinger Inc. Для оптимизации геометрии молекул выбран метод теории функционала плотности (DFT) с гибридным обменно-корреляционным функционалом, с использованием базиса 6.31. Экспериментальные результаты сопоставлены с теоретическими расчётами электронной структуры циклических каликсаренов и отдельных фрагментов, образующих молекулы каликсаренов.

В данной работе экспериментально и теоретически показано, что электронная плотность на атомах серы мало зависит от конформации и от заместителей в верхнем и нижнем ободах. Электронная плотность на атомах кислорода зависит от конформации. По результатам данной работы можно сделать вывод, что электроны кислорода в молекулах-конусах лежат глубже, чем электроны серы. Это свидетельствует о том, что именно атомы серы обладают наибольшей реакционной способностью в этих соединениях. Следовательно, тиакаликсарены имеют преимущество перед обычными каликсаренами в процессе экстракции. В молекулах-альтернатах же электроны и кислорода и серы располагаются равномерно по уровням ВЗМО (высшим занятым молекулярным орбиталям). Полученные экспериментальные данные хорошо согласуются с проделанными квантово-химическими расчётами.

ВЛИЯНИЕ ЗАМЕЩЕНИЯ ИОНОВ Mn НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА CaMnO_3 Мостовщикова Е.В.^{1*}, Наумов С.В.¹, Солин Н.И.¹, Телегин С.В.^{1,2}, Борисова А.Б.²¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия²Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия*E-mail: mostovsikova@imp.uran.ru

Электронное легирование манганитов на основе CaMnO_3 , привлекательных богатыми фазовыми диаграммами [1], чаще всего достигается путём замещения ионов Ca в CaMnO_3 трёх- или четырёхвалентными ионами La^{3+} , Ce^{4+} либо при создании дефицита по кислороду. Другим способом является замещение ионов Mn пяти- или шестивалентными ионами Mo^{6+} , W^{5+} , которое не только создаёт носители заряда, но и напрямую влияет на Mn – O – Mn связь, определяющую взаимосвязь между магнитными и транспортными свойствами манганитов. В настоящее время имеется небольшой ряд работ, в которых рассматриваются в основном магнитные и транспортные свойства Mn-замещённых манганитов. Оптические свойства таких материалов в настоящее время не исследованы, хотя изучение спектров отражения и поглощения позволяет получить дополнительную информацию о кристаллической структуре и определить параметры носителей заряда. Целью настоящей работы являлось изучение эволюции спектров отражения и поглощения в среднем ИК диапазоне манганитов $\text{CaMn}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_3$ с $x \leq 0.07$ и сравнение с данными для $\text{Ca}_{1-y}\text{La}_y\text{MnO}_3$ с одинаковым соотношением ионов $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$.

Анализ спектров отражения показал, что в отличие от $\text{Ca}_{1-y}\text{La}_y\text{MnO}_3$ замещение ионов Mn в CaMnO_3 существенно влияет на изменение фоновой спектра: уменьшается интенсивность первой фоновой полосы при $\lambda \approx 17 \mu\text{m}$, связанной со сложными колебаниями в октаэдре MnO_6 [2]. Данные изменения связываются с большей (почти в 2 раза) массой иона Mo^{6+} . Друде-подобный вид спектров отражения в $\text{CaMn}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_3$ с $x = 0.02$ близок к тому, что наблюдался в $\text{Ca}_{1-y}\text{La}_y\text{MnO}_3$ при $y = 0.04$, т.е. при такой же средней валентности ионов Mn [3]. Однако дальнейшее увеличение концентрации Mo^{6+} не приводит к усилению Друде-вклада.

В спектрах коэффициента поглощения $\text{CaMn}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_3$ окно прозрачности шире, чем в $\text{Ca}_{1-y}\text{La}_y\text{MnO}_3$, что, вероятно, является результатом уменьшения интенсивности и/или сдвига первой полосы фундаментального поглощения, которая формируется межзонными переходами между состояниями $O(2p)$ и $\text{Mn}(3d)$ [4, 5].

Различия оптических свойств $\text{CaMn}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_3$ и $\text{Ca}_{1-y}\text{La}_y\text{MnO}_3$ коррелируют с данными электропроводности для этих электронно-легированных манганитов.

Работа выполнена при поддержке Президиума РАН и РФФИ (грант № 12-02-00208).

1. Лошкарёва Н.Н., Мостовщикова Е.В.. ФММ, **113**, 22 (2012)
2. Fedorov I., Lorenzana J., Dore P. et al. Phys. Rev. B **60**, 11875 (1999)
3. Mostovshchikova E.V., Loshkareva N.N., Gizhevskii B.A., et al. JMMM **300**, e147 (2006)
4. Loshkareva N. N., Nomerovannaya L. V., Mostovshchikova E. V., et al. Phys. Rev. B **70**, 224406 (2004)
5. Номерованная Л.В., Махнев А.А., Балбашов А.М.ФТТ, **48**, 291 (2006)

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВОДОРОДА В ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ ПОСЛЕ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО НАСЫЩЕНИЯ

Николаева А.Н.* , Залогина А.С., Кудияров В.Н., Пушилина Н.С., Лидер А.М.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

*E-mail: aleksandra.nikolayeva@gmail.com

Растворение водорода в металле характеризуется его неравномерным распределением от поверхности к объёму. При этом на градиент концентрации водорода в материале могут оказывать влияние такие факторы как условия обработки поверхности, температура эксплуатации, количество дефектов и т.д. Для исследования распределения водорода применяются методы вторичной ионной масс-спектропии, ядер отдачи, термодесорбционная и оптической эмиссионной спектроскопии. К очевидным преимуществам оптической эмиссионной спектрометрии следует отнести экспрессность, низкую стоимость анализа и хорошо отработанную процедуру автоматизированной подготовки проб [1].

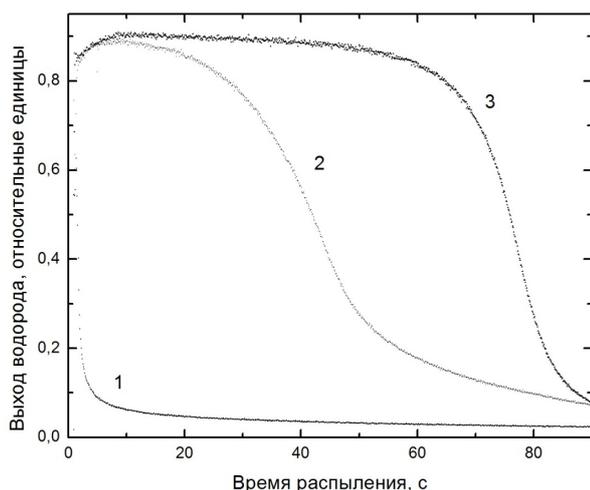


Рис. 1. Профили распределения водорода по глубине образцов: 1 – исходный после отжига без насыщения; 2 – насыщение при комнатной температуре; 3 – насыщение при температуре электролита равной 70°C.

Электролитическое насыщение водородом титанового сплава ВТ1-0 проводилось в 1М водном растворе серной кислоты в течение 6 часов при плотности тока 0,73 А/см², при комнатной температуре и при 70°C. Анодом служила платиновая пластина. В исходных образцах после вакуумного отжига водород присутствует в тонком поверхностном слое (менее 0,3 мкм). После электролитического насыщения на поверхности образцов образуется слой с высоким содержанием водорода. Согласно данным рентгеноструктурного анализа, такой слой состоит из фазы TiH₂. В образцах насыщенных при комнатной температуре, интенсивность выхода водорода значительно начинает снижаться после 20 секунд распыления, в то время как интенсивность выхода водорода в образце насыщенном при температуре 70°C начинает значительно спадать после 70 секунды.

Максимум интенсивности выхода водорода у образцов, как насыщенных при комнатной температуре, так и при повышенной температуре, совпадают. Анализ профиля распределения водорода в титановом сплаве показал, что толщина гидридного слоя в образцах, насыщенных при температуре 70°C в 3-4 раза больше, чем у образцов, наводороженных при комнатной температуре.

1. Шапон П. Аналитика и контроль, 11, №1, 47 (2007)

ИССЛЕДОВАНИЯ СИЛЬНО ЛЕГИРОВАННЫХ КРЕМНИЕМ AlGaN СЛОЁВ,
ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИЛАНА

Осинных И.В.^{1*}, Журавлев К.С.¹, Протасов Д.Ю.¹, Малин Т.В.¹, Давыдов В.Ю.², Смирнов А.Н.²,
Кютт Р.Н.², Спирина А.В.³, Соломонов В.И.³

¹Институт физики полупроводников им А.В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, Россия

²Физико-технический институт им А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, Россия

³Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: osinus-sb@ya.ru

Прямозонные полупроводники GaN и AlGaN — очень удобные материалы для разработки светодиодов, транзисторов с высокой подвижностью электронов, резонансно туннельных диодов, фотодетекторов ультрафиолетового спектрального диапазона. Изменяя содержание Al в твёрдых растворах на основе GaN, можно получать материал с шириной запрещённой зоны от 3,42 до 6,2 эВ, покрывая, таким образом, спектральный диапазон 200—365 нм. В процессе роста AlGaN слоёв методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) из аммиака в качестве источника легирования традиционно используется кремний. Однако в аммиачной атмосфере на поверхности кремния образуется плёнка нитрида кремния, которая уменьшает поток кремния, что затрудняет контроль за уровнем легирования выращиваемых слоёв. Решением этой проблемы стал выбор силана (SiH₄) в качестве источника легирования.

Слои Al_xGa_{1-x}N толщиной 1,1-1,3 мкм с широким содержанием Al (0 < x < 0,6) были выращены методом МЛЭ из аммиака на (0001)-ориентированной сапфировой подложке. Структурные свойства выращенных слоёв были исследованы средствами атомно-силовой микроскопии и дифракции рентгеновских лучей. Электрические свойства были определены из холловских измерений и спектров комбинационного рассеяния света, оптические свойства были исследованы методами фотolumинесцентной и катодolumинесцентной спектроскопии.

С ростом уровня легирования структурное совершенство исследуемых образцов ухудшалось, однако при этом интенсивность краевой люминесценции возрастала. С увеличением содержания Al в слоях Al_xGa_{1-x}N зависимость интенсивности краевой люминесценции от уровня легирования становится более слабой. После достижения критического значения концентрации (> 3 · 10¹⁹ см⁻³) интенсивность люминесценции слоёв GaN и Al_{0,3}Ga_{0,7}N резко падала до уровней нелегированных образцов. Механизм данного явления, скорее всего, различался для материалов GaN и Al_{0,3}Ga_{0,7}N. В сильнолегированных образцах GaN электроны заполняют зону проводимости, в пользу чего говорит сдвиг полосы краевой люминесценции в коротковолновую область. Эти свободные электроны могут быть легко захвачены центрами безызлучательной рекомбинации, следовательно, интенсивность излучательной рекомбинации падает. В широкозонном материале Al_{0,3}Ga_{0,7}N наблюдается сдвиг полосы краевой люминесценции в длинноволновую область, вызванный уменьшением ширины запрещённой зоны при увеличении уровня легирования [1]. Сублинейная зависимость концентрации электронов в слоях AlGaN от потока силана означает, что легирование вызывает образование дефектов, становящихся ловушками для электронов. При очень высоком уровне легирования безызлучательный канал рекомбинации становится доминирующим. Увеличение плотности прорастающих дислокаций с ростом уровня легирования ведёт себя похожим способом для сплавов AlGaN с различным x, поэтому канал безызлучательной рекомбинации не обусловлен этим типом структурных дефектов.

1. H.P.D. Schenk, S.I. Borenstain, A. Berezin, A. Schon, E. Cheifetz, S. Khatsevich, and D.H. Rich, J. Appl. Phys. **103**, 103502 (2008)

СОГЛАСОВАННЫЙ LDA'+DMFT ПОДХОД ДЛЯ СИЛЬНО-КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ

Павлов Н.С.^{1*}, Некрасов И.А.¹, Садовский М.В.^{1,2}¹Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: pavlovns@gmail.com

Сильно коррелированные соединения интенсивно исследуются в современной физике конденсированного состояния. К ним относятся большинство соединений, содержащих d или f химические элементы, например, высокотемпературные сверхпроводники, широкощелевые диэлектрики, системы с тяжёлыми фермионами и т.д. Основным теоретическим методом для описания электронных свойств сильно коррелированных систем является объединённый подход LDA+DMFT [1] – теории функционала электронной плотности в приближении локальной электронной плотности LDA и теории динамического среднего поля DMFT.

В данной работе предложено решение проблемы поправки на двойной учёт, возникающей при объединении двух совершенно разных подходов LDA и DMFT. В частности, предложено не учитывать обменно-корреляционный вклад взаимодействия в LDA расчёте для сильно коррелированных электронных состояний (d или f). А в DMFT поправку на двойной учёт брать в виде Хартри. Данный подход получил название LDA'+DMFT [2].

В рамках LDA'+DMFT получены результаты: плотности состояний, спектральные функции и оптические проводимости для наиболее типичных представителей двух классов сильно коррелированных систем: диэлектриков с переносом заряда MnO, CoO, NiO и коррелированных металлов SrVO₃, Sr₂RuO₄. Показано, что для NiO и CoO результаты LDA'+DMFT качественно лучше, чем результаты LDA+DMFT с поправкой на двойной учёт в виде Хартри, поскольку в LDA+DMFT они находятся в металлической фазе. Так же впервые в расчёте MnO, CoO, NiO были учтены $4s$ состояния, которые имеют большую ширину и простираются практически до уровня Ферми. Для MnO, CoO, NiO получено хорошее согласие с оптическими и фотоэмиссионными спектрами. Для сильно коррелированных металлов в LDA'+DMFT наблюдается хорошее согласие с предыдущими LDA+DMFT расчётами и существующими экспериментальными данными (величиной щели и положением кислородных состояний), по сравнению с LDA+DMFT результатами. Результаты работы опубликованы в [2,3].

1. Held K., Nekrasov I.A., Keller G., Eyert V., Blümer N., McMahan A.K., Scalettar R.T., Pruschke T., Anisimov V.I., and Vollhardt D., in *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, (Eds. J. Grotendorst, D. Marks, A. Muramatsu) NIC Series Volume 10 (2002) p. 175, (arXiv:cond-mat/0112079v1)
2. Nekrasov I.A., Pavlov N.S., Sadovskii M.V., Письма в ЖЭТФ **95**, 659 (2012), (arXiv:1204.2361)
3. Nekrasov I.A., Pavlov N.S., Sadovskii M.V., arXiv:1208.4732

ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДОВ НА РЕНТГЕНОВСКИЕ K - СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ МЕДИ В $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$

Перегудова Н.Н.^{1*}, Коротчаев Е.В.¹, Пичугин А.Ю.¹, Быков Р.В.², Сыроквашин М.М.³,
Морозов Н.И.³, Сотников А.В.³

¹)Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

²)Новосибирский государственный технический университет, г. Новосибирск, Россия

³)Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Россия

*E-mail: Pe-nat@mail.ru

Слоистые дисульфиды хрома-меди $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x = 0 \div 0.4$) благодаря своим магниторезистивным свойствам являются потенциальными материалами для спинтроники. Наличие колоссального магнетосопротивления данных соединений связывают с сосуществованием в них зарядовых/магнитных состояний $\text{Cu}^+\text{Cr}^{3+}\text{S}_2^-$ ($S_{tot} = 3/2$) и $\text{Cu}^{2+}\text{Cr}^{2+}\text{S}_2^-$ ($S_{tot} = 5/2$), соотношение между которыми меняется в зависимости от содержания ванадия [1].

В этой связи интересным является изучение влияния катионного замещения атомов хрома атомами ванадия на зарядовое состояние атомов меди и хрома в соответствующих магнитных полупроводниках $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x = 0 \div 0.4$).

Одним из методов изучения зарядового состояния атомов в химических соединениях является метод рентгеновской абсорбционной спектроскопии. Так как энергетическое положение K -края поглощения зависит от зарядового состояния атома, следовательно для его определения могут быть использованы рентгеновские спектры поглощения. Изучая химические сдвиги K -края поглощения можно получить такую же информацию о распределении электронной плотности, как и в случае применения рентгеновских фотоэлектронных спектров внутренних уровней соответствующих атомов.

Исследование слоистых дисульфидов хрома меди с помощью метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показало, что в структуре $\text{Cu}(2p_{3/2,1/2})$ -спектров наблюдаются компоненты, соответствующие электронным конфигурациям $3d^9L^0$ и $3d^{10}L^+$. Существование данных компонент обосновано в рамках модели переноса зарядов (СТ-модель) [2]. Поскольку процессы поглощения, эмиссии фотоэлектронов и характеристического рентгеновского излучения взаимосвязаны, то соответствующие конфигурации должны также проявляться в рентгеновских эмиссионных и абсорбционных спектрах меди [3].

В настоящей работе на основании «привязки» рентгеновских фотоэлектронных $\text{Cu}(2p_{3/2,1/2})$ -, рентгеновских эмиссионных $\text{Cu}(K\alpha)$ - и рентгеновских абсорбционных K -спектров поглощения меди наблюдается проявление конфигураций $3d^9L^0$ и $3d^{10}L^+$ в структуре K -краёв поглощения и спектров $K\alpha$ -эмиссии меди для случая дисульфидов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x = 0 \div 0.4$).

Исследования проводятся при поддержке гранта РФФИ № 12-02-31589 мол_а.

1. Abramova G.M., Petrakovsky G.A., Low Temperature Physics, **32**, 954 (2006)
2. Larsson S., Journal of electron spectroscopy and related phenomena, **8**, 171 (1976)
3. Осадчий М.С., Мурахтанов В.В., Фомин Э.С., Мазалов Л.Н., Журнал экспериментальной и теоретической физики, **101**, 1259 (1992)

МЕЖАТОМНЫЕ РАССТОЯНИЯ ДЛЯ ПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ СФЕР В ТВЁРДЫХ РАСТВОРАХ NiZnO

Пономарев Д.А.*, Бабанов Ю.А., Саламатов Ю.А.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Твёрдые растворы $Ni_xZn_{1-x}O$ имеющие кристаллическую структуру каменной соли, относятся к группе широкозонных полупроводников с сильной ионной связью. Эти твёрдые растворы интересны как с фундаментальной, так и с практической точек зрения. Они синтезируются с использованием высоких давлений (7.7 ГПа) и температур (1450 – 1650 К) [1]. После синтезирования были сняты EXAFS-спектры твёрдых растворов с использованием синхротронного излучения в Российском научном центре «Курчатовский институт». Полученная информация о первых межатомных расстояниях в твёрдых растворах типа $Ni_xZn_{1-x}O$ из данных EXAFS-спектроскопии не совпадает с той, что получена из данных рентгеновской дифракции. Используя, полученную информацию, можно говорить о том, что правило Вегарда локально не выполняется.

В данной работе использовался метод регуляризации Тихонова для решения некорректной задачи и получения первых межатомных расстояний [2] для твёрдых растворов $Ni_xZn_{1-x}O$ с молярной концентрацией компонента $x = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$, имеющих кристаллическую структуру каменной соли. В таблице приведены полученные данные.

Образец	Ni-Ni, Å	Ni-O, Å	Ni-Zn, Å	Zn-O, Å	Zn-Zn, Å
NiO	2.952	2.079	-	-	-
$Ni_{0.7}Zn_{0.3}O$	2.947	2.079	3.014	2.106	3.050
$Ni_{0.5}Zn_{0.5}O$	2.956	2.071	2.983	2.119	3.041
$Ni_{0.3}Zn_{0.7}O$	2.966	2.084	2.989	2.127	3.025
ZnO	-	-	-	2.135	3.017

Работа выполнена при частичной поддержке Президиума УрО РАН, грант № 12-П-2-1032.

1. Соколов П.С., Синтез кубической модификации оксида цинка и твёрдых растворов на её основе при высоких давлениях и температурах. Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата химических наук. Москва, (2010)
2. Каменский И.Ю., Кунике М., Райх Т., Функе Х., Бабанов Ю.А., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **11**, 95 (2003)

САТЕЛЛИТНАЯ СТРУКТУРА В РЕНТГЕНОВСКИХ ФОТОЭЛЕКТРОННЫХ И ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРАХ ФТАЛОЦИАНИНОВ МЕДИ

Семушкина Г.И., Пляшкевич В.А., Гуляев Р.В.

¹)ИНХ СО РАН, г. Новосибирск, Россия²)ИК СО РАН, г. Новосибирск, РоссияE-mail: spectroscopy@mail.ru

Фталоцианиновые комплексы переходных металлов, в частности, фталоцианины меди, в течение многих лет находятся в центре внимания учёных [1]. Эти вещества представляют интерес благодаря наличию полупроводниковых, каталитических, электро- и фотолюминесцентных свойств, а также химической инертности и термической стабильности, что значительно расширяет круг их использования.

Изучению рентгеновских фотоэлектронных и эмиссионных спектров внутренних $2p_{3/2,1/2}$ уровней двухвалентной меди в различных соединениях, имеющих сложную сателлитную структуру, посвящено большое число экспериментальных и теоретических работ [2]. Однако к настоящему времени нет единого мнения исследователей относительно природы возникновения этой структуры. Поэтому изучение механизмов образования сателлитов во фталоцианиновых комплексах представляет большой интерес для понимания их электронной структуры и связи особенностей электронной структуры с физико-химическими свойствами функциональных материалов на их основе.

Настоящая работа посвящена исследованию механизмов образования сателлитов в рентгеновских фотоэлектронных ($2p_{3/2,1/2}$) и эмиссионных спектрах ($K\alpha_{1,2}$, $L\alpha$) фторзамещённых и незамещённых фталоцианинов меди. Показано, что общепринятая модель, используемая для интерпретации рентгеноэлектронных спектров меди, в соответствующих соединениях — модель переноса заряда (charge transfer – СТ модель) [3] хорошо объясняет процессы, происходящие при эмиссии. В частности, главному максимуму в $2p_{3/2}$ рентгеновских фотоэлектронных спектров меди фталоцианинов меди, соответствует конфигурация ($2p^5 3d^{10} L^{-1}$), а сателлитная линия может быть отнесена к конфигурации ($2p^5 3d^9$). По аналогии проведённое теоретическое рассмотрение структуры эмиссионных $K\alpha_{12}$ -линий с учётом процессов, связанных с переносом заряда $L \rightarrow M$, показывает, что энергетическое положение максимума $K\alpha_1$ -линии будет зависеть от взаимного относительного энергетического положения и относительной интенсивности главной и сателлитной линий. В соответствующих спектрах будут присутствовать также компоненты, обусловленные «перекрестными» переходами.

Другим фактором, который оказывает влияние на энергетическое положение $K\alpha_1$ -линии и ее ширины, является наличие неспаренного электрона на внешней молекулярной орбитали изучаемых комплексов ($3d^9 L$ -конфигурация). В этом случае необходимо учитывать обменное взаимодействие электронов незаполненной $2p^5$ – оболочке с неспаренным $3d$ электроном, находящимся на внешней молекулярной орбитали комплекса. Учёт соответствующего $2p-3d$ обменного взаимодействия приводит к сложной структуре спектра, которая может проявляться как в рентгеноэлектронных, так и рентгеновских эмиссионных спектрах.

1. Симон Ж., Андре Ж.-Ж. Молекулярные полупроводники. М. (1988)
2. Carniato S., Dufour G., Luo Y., H. Agren // Phys. Rev. B **66**, 045105-1 - 045105-12 (2002)
3. Larsson S. // chem.phys.lett., V32, №3, 1975.

ЭМИССИОННАЯ МЁССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГРАНИЦ ЗЁРЕН ПОЛИ- И СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО Мо

Сергеев А.В.*, Попов В.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Изучены границы зёрен в поли- и субмикрористаллическом Мо методом эмиссионной ядерной гамма резонансной (ЯГР) спектроскопии. Исследования проводились с использованием мессбауэровского изотопа ^{57}Co , который после электролитического осаждения на поверхность образца проникает в границы зёрен в процессе диффузионного отжига. Первый отжиг проводился при температуре, когда объёмная диффузия отсутствует. Следующие отжики проводились при последовательно увеличивающихся температурах, после каждой из которых снимался ЯГР спектр.

Образцы поликристаллического Мо до начала исследований подвергались стабилизационному отжигу при 1200°C , после которого средний размер зерна составлял 30 мкм, а границы зёрен находились в состоянии близком к равновесному. Образцы субмикрористаллического Мо были получены кручением под высоким давлением (КВД) при температуре 350°C , давлении 6 ГПа и 5 оборотах.

В эмиссионных спектрах поликристаллического Мо в течении всего исследования наблюдаются две компоненты, одна из которых формируется мессбауэровскими атомами, расположенными в границах зёрен, а другая – атомами, расположенными в приграничных областях. На основе значений изомерных сдвигов этих компонент был сделан вывод, что атомы ^{57}Co диффундируют в границах зёрен Мо по междоузельному механизму.

Эмиссионные мессбауэровские исследования субмикрористаллического Мо показали, что при 350°C в спектре также присутствуют 2 компоненты, и зёрнограничная диффузия идёт по междоузельному механизму. Однако состояния границ зёрен в поли- и субмикрористаллическом Мо после такого отжига значительно отличаются, потому что при интенсивной пластической деформации (ИПД) формируются неравновесные границы и их состояние сохраняется после отжига при 350°C . Также оказалось, что в процессе КВД при 350°C зона, где преобладает зёрнограничная диффузия, обогащается примесями, в особенности кислородом, также как и в структурных вакансиях.

В спектрах образцов, отожжённых при 400°C , наряду с компонентами, соответствующими атомам, расположенным в неравновесных границах зёрен и приграничных областях, появляются 2 новые компоненты, параметры которых близки к параметрам поликристаллического Мо. Эти две новые компоненты соответствуют тем участкам границ зёрен, которые при нагреве теряют свою неравновесность, и примеси внедрения из которых уходят. Показано, что начиная с 600°C , неравновесные границы, сформированные при ИПД, практически исчезают и состояние границ зёрен становится близким к тому, что наблюдается в поликристаллическом Мо.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 12-П-2-1016), частичной поддержке Президиума РАН и РФФИ (проекты № 10-03-00530 и 12-03-31683 мол_а).

ДОЗИМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ AlN С ПРИМЕСЬЮ КИСЛОРОДА

Спиридонов Д.М.*, Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А.

УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
НОЦ «Наноматериалы и нанотехнологии», г. Екатеринбург, Россия*E-mail: d.m.spiridonov@ustu.ru

За счёт своих функциональных свойств, таких как прочность, радиационная стойкость, теплопроводность и большая ширина запрещённой зоны нитрид алюминия является перспективным материалом для создания чувствительных детекторов ионизирующего излучения. В ряде последних работ была рассмотрена возможность применения конденсированных сред на основе монокристаллов и порошков AlN в измерительных системах для оценки поглощённой дозы β - и УФ-излучения методами термо- и оптически стимулированной люминесценции. Объёмные монокристаллы нитрида алюминия стали синтезировать сравнительно недавно, и на сегодня для них накоплено недостаточно данных о механизмах радиационно-наведённой люминесценции и процессах запасаения дозиметрической информации. В этой связи цель настоящей работы состояла в анализе дозовых зависимостей для параметров термолюминесцентного отклика в УФ-облученных монокристаллах AlN.

В работе исследовались монокристаллические образцы, полученные из промышленного порошка AlN методом сублимации-реконденсации (ООО «Нитридные кристаллы»). По данным масс-спектропии содержание примесей кислорода не превышало 10^{18} см^{-3} . Диаметр образцов – 15 мм, толщина – 0.25-0.50 мм, поверхность – *epi-ready*. Все измерения проводились на оригинальном спектрометрическом комплексе. Облучение образцов осуществлялось при комнатной температуре монохроматическим и нефильтрованным УФ-светом. Доза варьировалась временем воздействия τ в течение 10 сек – 60 минут. Измерение интенсивности термолюминесценции проводилось при линейном нагреве облучённого образца от комнатной температуры до 673 К со скоростью 2 К/с.

Для полученных термоактивационных кривых, представляющих собой широкий бесструктурный пик, выполнена оценка геометрических параметров: температуры максимума, полуширины и фактора формы. Обнаружено, что при увеличении времени τ происходит смещение положения максимума в область более высоких температур, при этом фактор формы изменяется незначительно. На основании формализма кинетических процессов общего порядка показано, что все экспериментальные данные с высокой точностью ($R^2 \approx 0.999$) могут быть описаны в рамках одноловучечной модели с энергией активации 0.54 ± 0.05 эВ, частотным фактором $(3.00 \pm 1.00) \times 10^4 \text{ с}^{-1}$ и порядком кинетики 1.49 ± 0.06 . На основании сравнения полученных данных с результатами независимых измерений, с учётом анализа формы экспериментальных кривых и оценки кинетических параметров сделаны заключения о механизмах наблюдаемого термовысвечивания. Показано, что термостимулированная люминесценция в монокристаллах AlN может возникать за счёт опустошения глубоких донорных уровней, сформированных азотными вакансиями, и дальнейшей рекомбинации электронов с ионизированными при УФ-облучении $(V_{\text{Al}} - O_{\text{N}})^{2-}$ -центрами.

Проанализированы дозовые зависимости светосуммы и максимальной интенсивности термолюминесценции, рассчитаны соответствующие коэффициенты сверхлинейности и выполнены оценки различных метрологических характеристик. Показано, что погрешности измерения и коэффициент вариации параметров полученных зависимостей удовлетворяют стандартным требованиям к коммерческим детекторам ионизирующего излучения. Сделан вывод о возможных практических применениях объёмных монокристаллов нитрида алюминия в качестве пассивных дозиметрических матриц УФ-излучения.

РАСЧЁТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ С ПОТЕНЦИАЛОМ БЕККЕ-ДЖОНСОНА

Гордиенко А.Б., Филиппов С.И.

Кемеровский государственный университет, г. Кемерово, Россия

E-mail: gordi@kemsu.ru

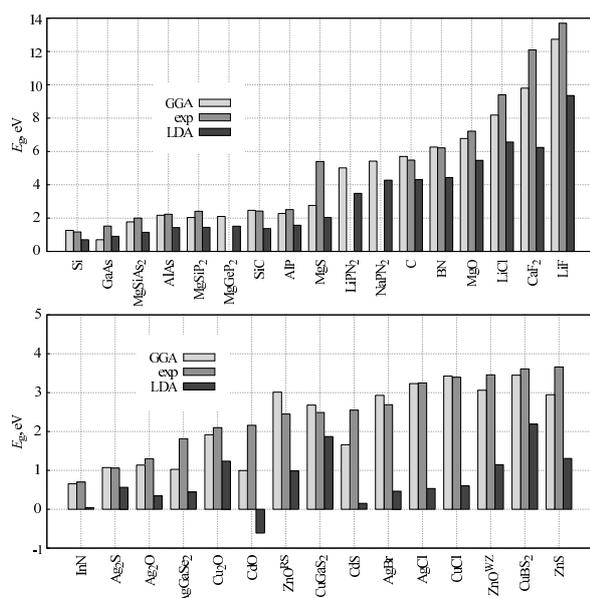


Рис. 1. Расчетные и экспериментальные значения E_g

Расчёты электронной структуры кристаллов были выполнены в базе псевдо-атомных орбиталей с использованием сепарабельных (HGН) псевдопотенциалов. Обменно-корреляционные эффекты учитывались в градиентном GGA-приближении (с использованием рассматриваемого потенциала ВJ) и, для сравнения, в локальном LDA.

Для кристаллов, не содержащих d -зон (рис. 1, верхняя диаграмма), LDA-приближение даёт стабильно заниженную оценку E_g (в среднем на 39%), тогда как использование потенциала ВJ позволяет уменьшить среднее отклонение в три раза — до 13%.

Для spd -кристаллов (нижняя диаграмма) LDA-приближение также занижает значение E_g , при этом для кристалла CdO наблюдается перекрытие валентной зоны и зоны проводимости, а среднее отклонение от эксперимента составило 70%. В противоположность локальному потенциалу, среднее отклонение при применении потенциала ВJ к расчётам кристаллов с d -электронами оказалось даже немного меньше, чем sp -соединений и составило 10%.

Таким образом, градиентный потенциал ВJ позволяет получать значения близкие к экспериментальным даже для сложных соединений при малых временных затратах, что делает потенциал ВJ привлекательной альтернативой другим методам исправления ширины запрещённой зоны.

1. Tran F, Blaha P, Phys. Rev. Lett., **102**, 226401 (2009)
2. Гордиенко А.Б., Филиппов С.И., Актуальные пробл. физ. тв. тела: сб. докл. Междунар. науч. конф., **3**, 321 (2011)

При расчётах электронной структуры полупроводников и диэлектриков в рамках теории функционала плотности одной из основных проблем, не имеющих простого универсального решения, остаётся проблема ширины запрещённой зоны. В настоящей работе рассматривается модифицированный вариант обменного потенциала Бекке-Джонсона (ВJ) [1], имеющий вид:

$$V_{X\sigma}^{BJ} = c V_{X\sigma}^{Slater} + \frac{3c - 2}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t_{\sigma}(\mathbf{r})}{\rho_{\sigma}(\mathbf{r})}}, \quad (1)$$

где t_{σ} — плотность кинетической энергии. Ранее было показано, что потенциал ВJ позволяет получать ширины запрещённых зон, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными [1, 2]. В данной работе это утверждение было проверено на 32 кристаллах, представляющих различные классы соединений.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРЕТНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИЭТИЛЕНА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ, НАПОЛНЕННОГО КРАХМАЛОМ И АЭРОСИЛОМ

Фомичева Е.Е.* , Бурда В.В.

Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена,
г. Санкт-Петербург, Россия*E-mail: e.e.fomicheva@gmail.com

Широкое применение в технике, медицине, промышленности находят электретные материалы, изготовленные из полимеров. Вместе с тем известно, что от момента утилизации полимера до его разложения проходят десятки лет. В связи с этим является актуальным добавление в полимерную матрицу наполнителей, приводящих к ускорению процесса деструкции полимера и при этом не ухудшающих его электретных свойств. Одним из материалов, ускоряющих процесс разложения полимера, является крахмал.

В данной работе исследовались электретные свойства композитных материалов на основе полиэтилена высокого давления (ПЭВД) методами термоактивационной спектроскопии. Объектами исследования являлись плёнки ПЭВД марки 15313-003 толщиной порядка 300 мкм, наполненные крахмалом и аэросилом марки А-175.

Результаты, полученные методами изотермической и термостимулированной релаксации потенциала, показали, что добавление крахмала в полиэтилен несколько снижает временную и температурную стабильность электретного состояния. Такое изменение электретных свойств можно объяснить тем, что в диапазоне температур 20–60°C идёт процесс преобразования крахмала в глюкозу с освобождением связанной воды, которой в крахмале достаточно много. Ранее было показано [1], что вода является катализатором процесса проводимости в полимерах, поэтому увеличение количества ее молекул приводит к увеличению проводимости и, как следствие, ухудшению электретной стабильности полиэтилена высокого давления.

Для улучшения электретных свойств получившегося композита в него был добавлен аэросил. В результате стабильность электретного состояния полимера возросла и стала даже выше, чем у ненаполненного полиэтилена. При этом оптимальным оказалось добавление 4 об.% крахмала и 1 об.% аэросила.

Для исследования релаксационных процессов, протекающих в композитных материалах, были получены спектры термостимулированной деполяризации. Результаты исследования показали, что спектры композитных материалов идентичны спектру исходного ПЭВД. Таким образом, можно сделать вывод, что крахмал не оказывает влияния на релаксационные процессы, протекающие в полиэтилене высокого давления. Добавление аэросила приводит к смещению пика, наблюдающегося на спектре ПЭВД при 90-95°C, в область более низких температур (50-60°C). Опираясь на проведённые ранее исследования [2], можно сделать предположение, что в композитных материалах присутствует дипольный механизм релаксации. Дипольный момент индуцируется в частице аэросила, на поверхности которой образуются заряженные гидроксильные группы. Заряд гидроксильные группы приобретают при взаимодействии с ионами, образующимися в результате диссоциации молекул воды, находящихся в объёме полимера.

1. Анискина Л.Б., Викторovich А.С., Галиханов М.Ф., Темнов Д.Э., Полиэлектrolитная модель волоконитов на основе полиэтилена и полипропилена, Известия РГПУ им. А.И. Герцена: Научный журнал. – СПб., **135**, 24-36 (2010)
2. Фомичева Е.Е., Темнов Д.Э., Галиханов М.Ф., Релаксационные процессы в композитных плёнках полипропилена, Вестник Казанского технологического университета, **10**, 223-230 (2010)

Резонансные явления

РЕЗОНАНСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

~ o ~

ЛОКАЛИЗАЦИЯ И ПОДВИЖНОСТЬ Li в ИОННОМ ПРОВОДНИКЕ
 Li_2ZrO_3 ПО ДАННЫМ ЯМР ${}^6,{}^7\text{Li}$

Арапова И.Ю.^{1*}, Верховский С.В.¹, Геращенко А.П.¹, Михалев К.Н.¹, Садыков А.Ф.¹,
Бакланова Я.В.², Денисова Т.А.², Шеин И.Р.²

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Институт химии твёрдого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Цирконат лития Li_2ZrO_3 является твёрдым электролитом (литий-ионным проводником) и может использоваться в качестве защитного покрытия анодных материалов на основе кремния [1]. Большинство исследований моноклинного цирконата лития относится к высокотемпературным фазам, полученным при температурах синтеза выше 1100°C. Сведения о влиянии температуры и режима синтеза Li_2ZrO_3 на его физико-химические характеристики крайне малочисленны и противоречивы [2-3]. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) позволяет получить ценную информацию о зарядовом распределении вблизи ионов лития и исследовать особенности ионной подвижности. В данной работе методом ЯМР ${}^6,{}^7\text{Li}$ были исследованы два поликристаллических образца Li_2ZrO_3 с различными температурами отжига (600°C и 1000°C).

Спектры ЯМР ${}^7\text{Li}$ записаны в области температур $T = 300 - 900$ К в магнитном поле 11.74 Т. Для обоих образцов Li_2ZrO_3 при комнатной температуре отчётливо видны две пары спутанных линий, соответствующие двум структурным позициям лития в соседних искажённых кислородных октаэдрах LiO_6 [4]. Для структурного отнесения линий выполнены расчёты градиента электрического поля для двух позиций лития Li1, Li2 в кристаллической решётке Li_2ZrO_3 полнопотенциальным методом линеаризованных присоединённых плоских волн (FLAPW). Результаты расчёта совпадают с экспериментальными данными. Согласно предложенному структурному отнесению линий, позиции Li2 являются некомплектными и содержат примерно 10(5) % вакансий. Дополнительное свидетельство о местах локализации вакантных позиций лития следует из результатов записи спектров ${}^6\text{Li}$ с вращением образца под магическим углом (MAS), записанных при комнатной температуре во внешнем магнитном поле 9.4 Т. Полученная зависимость квадрупольной структуры спектров ЯМР ${}^7\text{Li}$ от температуры, является прямым свидетельством того, что атом лития совершает прыжки между двумя структурными позициями Li1 и Li2.

Работа выполнена в рамках междисциплинарного проекта ИФМ УрО РАН – ИХТТ УрО РАН № 12-М-23-2061, и гранта Президента РФ для молодых учёных № МК-1232.2011.2.

1. Li M., Qu M., He X., Yu Z. Journal of Power Sources, **188**, 546 (2009)
2. Guo L., Wang X. et al. Applied Surface Science, **257**, 8106 (2011)
3. Денисова Т.А., Максимова Л.Г. и др. Альтернативная энергетика и экология. **7**(51), 29 (2007)
4. Pantyukhina M.I., Obrosov V.P., Stepanov A.P. et. al. Crystallography Reports **49**, 676 (2004)

ОРБИТАЛЬНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В LaMnO_3 ПО ДАННЫМ ЯМР ^{17}O И ^{139}La

Волкова З.Н.*, Михалёв К.Н., Верховский С.В., Геращенко А.П.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: volkovazn@mail.ru

Электронные и решеточные степени свободы в LaMnO_3 и их сильная взаимосвязь, приводящая к орбитальному упорядочению ниже температуры $T = 750$ К, являются предметом исследования многих теоретических и экспериментальных работ.

Электронные свойства LaMnO_3 определяются видом волновой функции основного e_g -состояния: $|\psi_g\rangle = \cos(\varphi/2)|3z^2 - r^2\rangle + \sin(\varphi/2)|x^2 - y^2\rangle$. При комнатной температуре методом нейтронного рассеяния было определено значение угла $\varphi \sim 108^\circ$ [1], которое отличается от значения $\sim 120^\circ$, вычисленного для упрощенной кубической перовскитной структуры с учетом одноэлектронного электрон-фононного взаимодействия [2], а также от значения $\varphi \sim 90^\circ$ для классического суперобменного механизма без учета Ян-Теллеровских искажений [3]. Только учет реальной структуры в DMFT-расчетах, параметров перескоков и кулоновского отталкивания дает значение угла $\varphi \sim 109^\circ$ [4], сопоставимое с экспериментом.

Выше температуры орбитального упорядочения ($T > 750$ К) решетка в среднем становится почти кубической, однако динамические Ян-Теллеровские искажения кислородных октаэдров сохраняются вплоть до $T \sim 1150$ К [5].

ЯМР-исследования на ядрах ^{17}O и ^{139}La , проведенные в данной работе, позволяют получить новую информацию о магнитной структуре и электронных свойствах в парамагнитной области как в орбитально-упорядоченной, так и в орбитально-неупорядоченной фазах LaMnO_3 . В ходе работы записаны спектры ЯМР ^{17}O и ^{139}La в температурном диапазоне 150 – 950 К в магнитном поле $H_0 = 11.7$ Т. Магнитные сдвиги ^{17}K и ^{139}K были определены с помощью компьютерного моделирования ЯМР спектров.

Из экспериментальных данных определена волновая функция e_g -электронов для нескольких температур. При комнатной температуре угол $\varphi \sim 109^\circ$ совпадает с полученными ранее оценками из структурных данных [1]. В области исчезновения дальнего орбитального порядка спектры ЯМР ^{17}O описываются усредненной по времени орбитальной конфигурацией с равными весами состояний e_g -дублета. Преобладающая в парамагнитной фазе ферромагнитная природа суперобменного взаимодействия между ионами марганца в плоскости ab наблюдается вплоть до температуры перехода $T = 750$ К, тогда как вдоль оси c антиферромагнитный тип обмена меняется на ферромагнитный, причем изменение начинается задолго до точки перехода ~ 500 К $< T = 750$ К. Выше точки перехода наблюдается изотропный ферромагнитный суперобмен между ионами Mn^{3+} .

Работа поддержана РФФИ, проект № 10-02-00358.

1. J. Rodriguez-Carvajal et al., Phys. Rev. B **57**, R3189 (1998)
2. J. Kanamori, J. Appl. Phys. **31**, S14 (1960)
3. J. Bata and A. M. Oles, Phys. Rev. B **62**, R6085 (2000)
4. E. Pavarini and E. Koch, Phys. Rev. Lett. **104**, 086402 (2010)
5. E. Granado et al., Phys. Rev. B **62**, 11304 (2000)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СТЕПЕНЬ ЗАКРЕПЛЕНИЯ СПИНОВ В ДВУХСЛОЙНОЙ ПЛЁНКЕ

Зюзин А.М., Сабаев С.Н.*, Бакулин М.А., Янцен Н.В.

Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, г. Саранск, Россия

*E-mail: sabaevsn@mail.ru

Целью настоящей работы являлось исследование влияния температуры на степень закрепления спинов в двухслойной плёнке и характеристики спектров спин-волнового резонанса (СВР).

Исследования проводились на двухслойных монокристаллических плёнках ферритов-гранатов, полученных методом жидкофазной эпитаксии. Толщина каждого из слоёв h определялась на их однослойных аналогах интерференционным методом. Состав и параметры плёнок приведены в таблице. Плёнки обладали различными значениями намагниченности M , параметра затухания α и полей однородного резонанса H_{0i} в слоях.

образец	№ слоя	Состав	h , мкм	M , кА/м	α
1	1	$Y_{2.98}Sm_{0.02}Fe_5O_{12}$	0.50	138.5	0.003
	2	$Sm_{1.2}Lu_{1.8}Fe_5O_{12}$	1.4	140	0.12
2	1	$Y_{2.98}Sm_{0.02}Fe_5O_{12}$	0.42	138.5	0.003
	2	$Sm_{0.45}Er_{2.55}Fe_5O_{12}$	1.8	105.9	0.2

Из температурных зависимостей числа спин-волновых (СВ) мод и их резонансных полей для образцов №1 и №2, при перпендикулярной ориентации внешнего магнитного поля относительно плоскости плёнки установлено, что при температуре $T = 20^\circ\text{C}$ в образце №1 возбуждается большее количество мод по сравнению с образцом №2. По мере увеличения температуры в интервале $20^\circ\text{C} < T < 175^\circ\text{C}$ количество возбуждаемых СВ-мод в образцах уменьшается. При дальнейшем увеличении температуры (в интервале $175^\circ\text{C} < T < 280^\circ\text{C}$) спектры СВР образцов №1 и №2 ведут себя по разному. В образце №1 количество возбуждаемых СВ-мод по прежнему уменьшается, в образце №2 число мод наоборот начинает возрастать. При температуре 280°C , когда слой закрепления (слой №2) переходит через точку Кюри, СВ-моды перестают возбуждаться в обоих образцах.

При параллельной ориентации внешнего магнитного поля относительно плоскости плёнки поведение спектров СВР с увеличением температуры носит иной характер. Во-первых, количество возбуждаемых СВ-мод у первого и второго образцов одинаковое, во-вторых, количество возбуждаемых СВ-мод, с возрастанием температуры, не изменяется.

Большее число наблюдаемых мод в образце №1 при перпендикулярной ориентации внешнего магнитного поля относительно плоскости плёнки связано с большей разностью $H_{01} - H_{02} \sim 215$ кА/м, а, следовательно, с большей степенью закрепления спинов (в образце №2 $H_{01} - H_{02} \sim 72$ кА/м). С увеличением температуры, разность полей однородного резонанса в слоях уменьшается. Однако в образце №2 $|H_{01} - H_{02}|$ в интервале температур $160^\circ\text{C} < T < 275^\circ\text{C}$ вновь начинает возрастать, а, следовательно, возрастает степень закрепления спинов, моды более высокого порядка вновь начинают возбуждаться. Необходимо отметить, что количество возбуждаемых мод зависит также от толщины слоя и параметра затухания.

При этом проявляется чёткая зависимость: с увеличением разности полей однородного резонанса, увеличивается число возбуждаемых СВ-мод. Причём эта зависимость проявляется как в случае, когда слой закрепления находится в состоянии реактивной среды $H_{01} < H_{02}$ так и дисперсивной $H_{01} > H_{02}$.

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ МУЛЬТИФЕРРОИКА CuCrO₂ МЕТОДАМИ ЯМР ^{63,65}Cu

Смольников А.Г.*, Оглобличев В.В., Садыков А.Ф., Пискунов Ю.В., Верховский С.В.,
Геращенко А.П.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: agsmolniko@gmail.com

Физические свойства системы с треугольной антиферромагнитной решёткой CuCrO₂ интенсивно изучаются в последнее время как экспериментально, так и теоретически. Конкуренция обменных взаимодействий ниже $T_N = 24,4$ К приводит в CuCrO₂ к образованию спиральной магнитной структуры, обладающей сегнетоэлектрическими свойствами [1].

В нашей работе представлены результаты ^{63,65}Cu ЯМР/ЯКР исследования в парамагнитной и упорядоченной фазах в монокристалле CuCrO₂. Спектры ЯМР/ЯКР ^{63,65}Cu были получены в широкой области температур (4.2 – 300) К и магнитном поле $H = (0 - 94)$ кОе при двух ориентациях кристалла в поле $H \parallel ab$, $H \parallel c$.

В парамагнитной фазе температурные зависимости магнитного сдвига $K_{ab}(H \parallel ab)$, $K_c(H \parallel c)$ хорошо описываются законом Кюри-Вейсса и повторяют поведение магнитной восприимчивости ($\chi_{ab,c}$). Сверхтонкие поля на позициях меди $H_{loc,ab,c} = 33$ кОе/ μ_B были определены с помощью $K_{ab,c} - \chi_{ab,c}$ диаграммы. Анализ ориентационной зависимости формы линии ЯМР ^{63,65}Cu позволил определить симметрию и направление главных осей тензора градиента электрического поля в кристалле. Тензор обладает аксиальной симметрией с параметром асимметрии $\eta = (V_{XX} - V_{YY})/V_{ZZ} \approx 0$ и значением константы квадрупольной частоты $^{63}\nu_Q \approx 27.0(4)$ МГц, $^{65}\nu_Q \approx 25.0(4)$ МГц. Главная ось тензора направлена вдоль оси c .

В магнитоупорядоченной фазе линия ЯМР резко уширяется. Ширина спектра при направлении поля $H \parallel c$ в пять раз больше, чем ширина спектра при направлении поля вдоль плоскости $H \parallel ab$.

При температуре $T = 77$ К $\gg T_N$ спектр ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) на ядрах ⁶³Cu и ⁶⁵Cu при $H = 0$ представляет собой две узкие линии на частотах $^{63}\nu_Q \approx 27.1(4)$ МГц, $^{65}\nu_Q \approx 25.1(4)$ МГц. В упорядоченной фазе при $T = 4,2$ К спектр ЯКР, как и спектры ЯМР при направлении магнитного поля вдоль оси c , превращается в два перекрывающихся дублета соответствующих двум изотопам меди.

Экспериментальные ЯМР и ЯКР спектры на изотопах ^{63,65}Cu удовлетворительно описываются теоретическими кривыми, построенными с учётом только дипольных полей, создаваемых на ионах меди магнитными моментами ионов хрома, при условии, что все моменты лежат в кристаллографической плоскости ab и формируют несоразмерную спиральную магнитную структуру с волновым вектором $\mathbf{Q}(0.329; 0.329; 0)$.

Работа была поддержана грантом Президента РФ (МК-1232.2011.2), РФФИ (№ 11-02-31814), УрО РАН (11-2-НП-477).

1. K. Kimura, H. Nakamura, K. Ohgushi, and T. Kimura, Phys. Rev. B **78**, 140401(R) (2008)

РАСЧЁТ АМПЛИТУДЫ СИГНАЛОВ И СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОАКУСТИЧЕСКИХ ОТКЛИКОВ АНСАМБЛЯ ПЬЕЗОЧАСТИЦ

Шеболкин М.Л., Котов Л.Н.

Сыктывкарский государственный университет, г. Сыктывкар, Россия

E-mail: lauke@mail.ru

В настоящее время широко используются устройства на поверхностных акустических волнах [1]. Действие таких устройств основано на акустоэлектронном взаимодействии. Акустоэлектронные характеристики материалов определяют свойства фильтров передачи и приёма. Для этих целей выращиваются новые кристаллы в лабораториях и затем исследуются их свойства.

В работе [2] приведены результаты исследований дефектности строения и ионопроводящих свойств кристаллов йодата кальция $\text{Ca}(\text{IO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ при вхождении примесей трёхвалентного железа с увеличением концентрации, которые были синтезированы в гелях в лаборатории Сыктывкарского государственного университета. Для исследования электроакустических свойств выращенных кристаллов использовался ВЧ импульсный генератор. Эксперимент выявил, что кристаллы обладают высоким пьезоэлектрическим коэффициентом. Были сняты электрические отклики ансамблей малых кристаллов (0,5-1 мм) в интервале частот 16-21 МГц с шагом 0,1 МГц. По данным эксперимента нельзя точно определить упругие и пьезоупругие модули, поскольку амплитуда отклика является функцией 3 параметров поля и 3 материальных констант. Для определения упругих и пьезоупругих модулей йодата кальция, в системе Maple на основе системы уравнений для упругой и электрических подсистем кристаллов [3], были смоделированы спектры.

Для расчётов амплитуды электрического отклика A_e на действие внешнего возбуждающего электрического поля были взяты 20 частиц с собственными частотами, близкими к частоте поля. Из уравнения была получена зависимость амплитуды электрического отклика от длительности импульса ($A_e(\Delta t)$). На участке $\Delta t = 15 \div 20$ мкс эта зависимость ведёт себя линейно, далее входит в насыщение. В области насыщения наблюдаются осцилляции, обусловленные расфазировкой колебаний кристаллов разных размеров, например, за счёт ангармонизма.

Зависимость амплитуды A_e от напряжённости внешнего ВЧ поля ($A_e(E)$), согласно использованной системы уравнений, является линейной. В эксперименте это наблюдается лишь для ансамблей кристаллов с малой концентрацией. С увеличением примеси железа наблюдается нелинейная зависимость $A_e(E)$. Это явление, возможно, обусловлено нелинейностью электродипольного и магнитодипольного взаимодействия.

На основании полученных результатов при моделировании и сравнении их с экспериментальными данными, были сделаны следующие выводы. Рассматриваемые образцы обладают ярко выраженными свойствами сегнетоэлектриков (по оценке значений диэлектрической проницаемости ϵ и зависимостям $A_e(E)$). Зависимости амплитуды A_e откликов ансамблей кристаллов от параметров возбуждения, в целом, подчиняются линеаризованным теоретическим расчётам.

1. Бугаев А.С., Дмитриев В.Ф., Кулаков С.В., Устройства на поверхностных акустических волнах, СПб.: ГУАП (2009)
2. О.И. Исакова, Л.Н. Котов, Ф.И. Демин, Сборник трудов Международной научной школы для студентов и аспирантов, Изд-во Мордовского университета (2003)
3. Kajimura K., Phys. Acoust. N.Y., **16**, 295 (1982)

Физика низких температур
ՖԻԶԻԿԱ ԿՆԻԶԿՆԻՃ ՄԵՄԲԵՐՅԱՄԼԵ

~ 0 ~

ТЕПЛОЁМКОСТЬ LaB_6

Анисимов М.А.^{1*}, Богач А.В.¹, Глушков В.В.¹, Демишев С.В.¹, Самарин Н.А.¹, Гаврилкин С.Ю.², Мицен К.В.², Шицевалова Н.Ю.³, Левченко А.В.³, Филипов В.Б.³, Gabani S.⁴, Flachbart K.⁴, Случанко Н.Е.¹

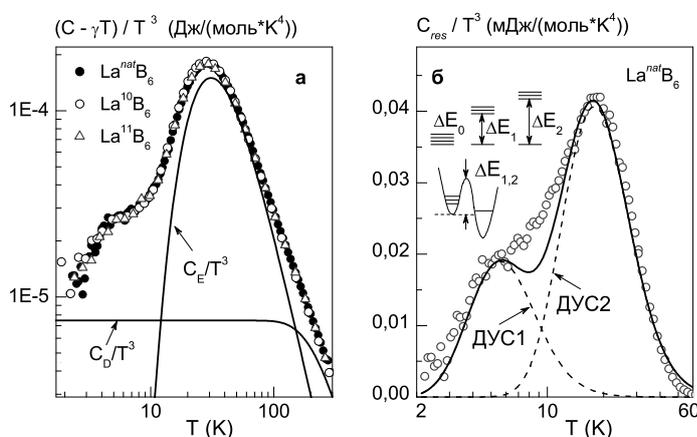
¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, г. Москва, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия

³Институт проблем материаловедения НАНУ, г. Киев, Украина

⁴Centre of Low Temperature Physics, IEP SAS, SK 04001 Kosice, Watsonova str. 47, Slovakia

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



Среди боридов редкоземельных (РЗ) элементов особо выделяются соединения на основе каркасных структур из нанокластеров бора и, в частности, гексабориды (RB_6). Благодаря простой ОЦК структуре, в которой РЗ атом оказывается слабо связанным с жёстким каркасом из атомов бора, представители указанного класса являются модельными объектами для изучения тепловых свойств. В настоящей работе изучается теплоёмкость немагнитного гексаборида лантана (LaB_6).

В работе выполнено исследование теплоёмкости высококачественных монокристаллов LaB_6 в области температур 2–300 К. Для оценки влияния вакансий бора нами изучены образцы La^NB_6 с различным изотопическим составом, включая изотопически чистые ($N = 10, 11$) и с естественным содержанием бора.

Анализ экспериментальных данных позволил корректно учесть (i) электронную компоненту $\gamma \approx 2.4$ мДж/(моль·К²), (ii) вклад квазилокальной колебательной моды редкоземельного (РЗ) иона с $\Theta_E \approx 152$ К, (iii) дебаевскую компоненту от жёсткого каркаса из атомов бора $\Theta_D \approx 1160$ К. В работе также изучен вклад дефектной моды ($C_{res} = C - \gamma T - C_D - C_E$), предсказанной для RB_6 ещё Касуей [1]. Действительно, результаты рентгеновских и нейтронных исследований RB_6 указывают на наличие примерно 1 – 9% вакансий по бору в зависимости от метода роста монокристалла (см., например, [2]). Присутствие вакансий бора приводит к смещению R^{3+} иона из центральносимметричного положения. Возникающий вследствие этого беспорядок усиливается с понижением температуры. Для оценки характеристик двухуровневого потенциала нами выполнен анализ остаточного вклада соотношением Шоттки для двух типов двухуровневых систем (ДУС), состоящих из синглетных и триплетных состояний. Показано, что значение ΔE_2 (высота барьера, см. вставку на Рис. 1б) лежит в интервале 96 – 98 К (в зависимости от изотопического состава образца) и определяется вакансиями бора с концентрацией $N_2 \sim 1.5 - 2.0\%$.

1. Takegahara K., Kasuya T., Solid State Communications, **53**, 21 (1985)

2. Korsukova M.M., Lundström T., Terenius T.E., Gurin V.N., Solid State Communications, **63**, 187 (1987)

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ХОЛОДИЛЬНЫЙ ЦИКЛ НА SF₆ С ФАЗОВЫМ ПЕРЕХОДОМ «ЖИДКОСТЬ-ТВЁРДОЕ ТЕЛО»

Паянен Р.И.

ОАО «ЭНИН» им. Г.М. Кржижановского, г. Москва, Россия

E-mail: reyno@mail.ru

Работа посвящена созданию холодильной установки с минимальной температурой минус 63°C. В качестве рабочего тела цикла выбран элегаз, поскольку установки, работающие на элегазе, обладают высокой объёмной холодопроизводительностью.

Изначально ставилась задача создания установки очистки SF₆ от низкокипящих примесей. Был проведён ряд экспериментов по исследованию фазовых равновесий в бинарной смеси «азот - элегаз» (азот здесь рассматривался как низкокипящая примесь). На основе полученных данных была разработана схема регенерации SF₆, представленная на рис. 1. После разработки принципиальной схемы установки и проведения расчётов было предложено использовать данную установку в качестве холодильной машины. Отличительной особенностью этой установки является наличие твёрдофазного испарителя. Так же возможно создание установки с жидкостным испарителем, что является более традиционным решением для холодильной техники.

Установка состоит из следующих основных элементов: 1. Сухой охлаждаемый компрессор, 2. Блок теплообменного оборудования, 3. Дроссель, 4. Сублиматор.

По принципу действия, установка является обычной холодильной машиной, в которой элегаз используется в качестве хладагента. После дросселирования элегаз переходит в твёрдое состояние и вылетает из сопла в виде мелкодисперсных кристаллов. При этом отбираемый пар из кристаллизатора существенно богаче по низкокипящим примесям в сравнении с твёрдой фазой. Обогащённый пар в виде обратного потока подаётся на компрессор и затем в конденсаторе избыток низкокипящих примесей выводится в адсорбер-утилизатор. Пополнение цикла осуществляется на входе в компрессор. Продукт — очищенный элегаз, получается в твёрдом состоянии. Его температура минус 63°C.

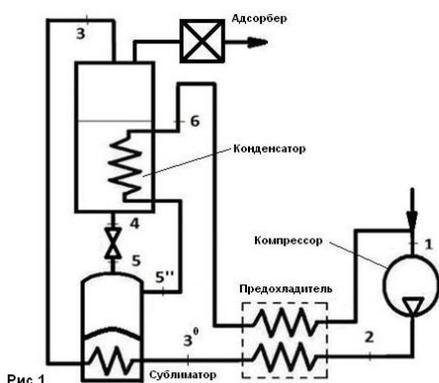


Рис.1

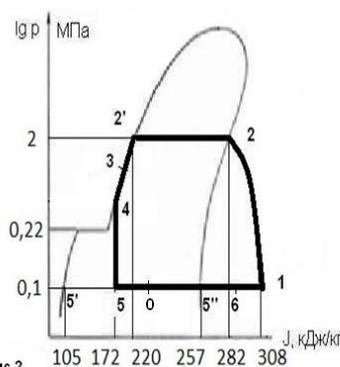


Рис.2

Диаграмма цикла представлена на рис. 2. Главным преимуществом данной установки является возможность использовать наработанный холод для охлаждения прямого потока.

1. Патент ФРГ № 1212245, кл.С01В, 17/45. 24.03.1966

2. Патент России №3048846. Приоритет 24.03.1994

РЕЗОНАНСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ УЛЬТРАЗВУКА НА ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ ЦЕНТРАХ В КРИСТАЛЛЕ $\text{ZnSe} : \text{Cr}^{2+}$ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Аверкиев Н.С.¹, Гудков В.В.², Жевстовских И.В.³, Барышников К.А.¹, Маякин В.Ю.², Сарычев М.Н.^{2*}

¹)Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, Россия

²)Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

³)Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: mak-sarychev@yandex.ru

Ультразвуковые исследования II-VI:3d кристаллов (см. [1] и ссылки в этой работе) показали, что эффект Яна-Теллера проявляется в виде пика затухания ультразвуковых волн α , и минимума фазовой скорости v в температурных зависимостях. Было доказано, что ультразвуковые измерения могут служить мощным инструментом для изучения ян-теллеровских параметров.

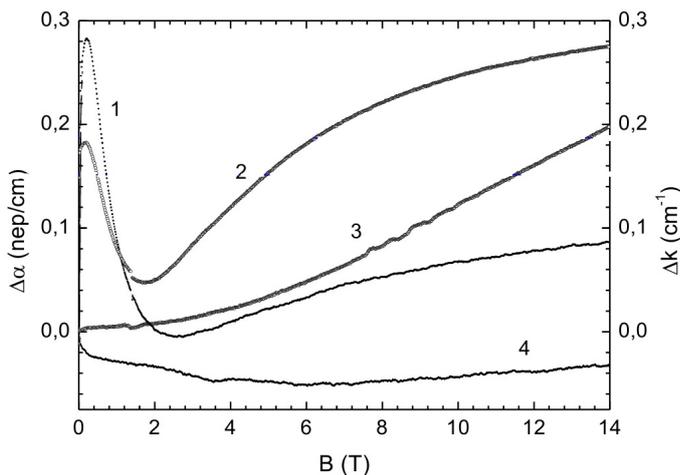


Рис. 1. Зависимость затухания α и волнового числа k ультразвуковой волны, поляризованной в направлении $[110]$ от магнитного поля.

Здесь мы приводим результаты экспериментов, проведённых во внешнем магнитном поле, ориентированном параллельно волновому вектору \mathbf{k} . Мы использовали кристалл $\text{ZnSe} : \text{Cr}^{2+}$ с концентрацией примеси $n = 3.8 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Он имеет структуру цинковой обманки с тетраэдрическим окружением ионов Cr^{2+} в ${}^5T_2(e^2t^2)$ в высокоспиновом основном состоянии. Волны частотой 23.7 МГц и 53.0 МГц распространялись вдоль оси $\langle 110 \rangle$ и имели поляризацию параллельно $[110]$ и $[001]$. Графики температурной зависимости $\alpha(T)$ и волнового числа $k(T)$ в постоянном магнитном поле $B = 7 \text{ Т}$ схожи с теми, что были получены при $B = 0 \text{ Т}$ [4] с изменением масштаба по $\alpha(T)$ приблизительно на 15%. Зависимости $\Delta\alpha(B) = \alpha(B) - \alpha(0)$ и $\Delta k(B) = k(B) - k(0)$ от магнитного поля при $T = 2 \text{ К}$, приведённые на рисунке (кривые 1 и 2 соответственно), указывают на существование резонансной аномалии, а также монотонного вклада. При более высоких температурах аномалии исчезают (см. кривые 3 и 4, которые соответствуют $\Delta\alpha(B)$ и $\Delta k(B)$ при $T = 20 \text{ К}$). Обнаруженные аномалии ультразвуковых параметров на полевой зависимости интерпретированы [2] как резонанс, связанный с переходами между туннельными уровнями [3].

Зависимости $\Delta\alpha(B) = \alpha(B) - \alpha(0)$ и $\Delta k(B) = k(B) - k(0)$ от магнитного поля при $T = 2 \text{ К}$, приведённые на рисунке (кривые 1 и 2 соответственно), указывают на существование резонансной аномалии, а также монотонного вклада. При более высоких температурах аномалии исчезают (см. кривые 3 и 4, которые соответствуют $\Delta\alpha(B)$ и $\Delta k(B)$ при $T = 20 \text{ К}$). Обнаруженные аномалии ультразвуковых параметров на полевой зависимости интерпретированы [2] как резонанс, связанный с переходами между туннельными уровнями [3].

1. Gudkov V.V., Bersuker I.B. et al, J. Phys.: Condens. Matter, **23**, 115401 (2011)
2. Gudkov V.V., Averkiev N.S. et al., XXI International Symposium on the Jahn-Teller Effect: Physics and Chemistry of Symmetry Breaking, Book of Abstracts, 177 (2012)
3. Bersuker I.B., The Jahn-Teller Effect, Cambridge University Press, 254 (2006)
4. Gudkov V.V., Bersuker I.B. et al., Solid State Phenomena. TTP, **190**, 707 (2012)

Структурные и механические
свойства твёрдых тел

Структурные и механические
свойства твёрдых тел

~ o ~

МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ ВОДОРОДНОГО ОХРУПЧИВАНИЯ НА ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН В СПЛАВАХ ТИТАНА

Бакулин А.В.*, Кулькова С.Е.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

*E-mail: bakulin@ispms.tsc.ru

Поведение водорода в металлах является предметом интенсивного исследования как экспериментаторов, так и теоретиков на протяжении всего последнего столетия [1]. Известно, что даже в небольших концентрациях водород сильно влияет на механические свойства переходных металлов и их сплавов из-за охрупчивания вследствие сорбции водорода. Это существенно ограничивает область технологического применения данных материалов, поскольку водород является естественным элементом окружающей среды. Для понимания поведения водорода в металлах и сплавах, а также его влияния на прочностные свойства необходимо принимать во внимание реальную поликристаллическую структуру материалов. Одним из наиболее важных внутренних интерфейсов в кристаллах являются границы зерен, которые могут быть причиной ухудшения механических свойств материалов [2].

Для расчетов атомной и электронной структуры бинарных интерметаллических сплавов титана использовался метод псевдопотенциала, реализованный программным кодом VASP [3], в рамках обобщенного градиентного приближения [4]. Для изучения была выбрана одна из наиболее простых, но характерных границ наклона (рисунок 1) для сплавов с данным типом симметрии.

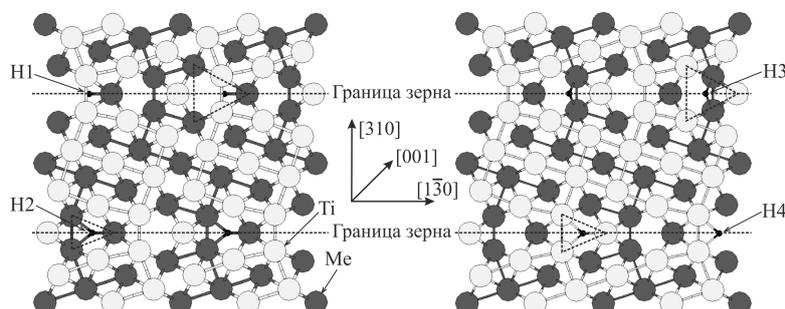


Рис. 1. Атомные структуры TiMe сплавов с симметричной границей наклона $\Sigma 5(310)$ и водородом в четырех позициях сорбции: H1 и H2 – водород в центре большого и маленького треугольников металла, H3 и H4 – водород в центре большого и маленького треугольников титана.

Показано, что энергия связи водорода на поверхности (310) выше, чем на симметричной границе наклона $\Sigma 5(310)$. Энергия адсорбции водорода в сплавах TiMe (Me = Ni, Co, Pd) в позициях, обогащенных металлом, уменьшается с увеличением порядкового номера металла в периодической системе. Установлено, что на границе наклона искаженная октаэдрическая позиция, обогащенная металлом (H3), менее предпочтительна для сорбции водорода, тогда как энергии сорбции водорода для остальных позиций практически равны. В целом показано, что сегрегация водорода на границы наклона приводит к уменьшению работы Гриффитса.

1. Алефельд Г., Фёлькль И., Водород в металлах, Мир (1981)
2. Rice J.R., Wang J.S., Mater. Sci. Eng. A **107**, 23 (1989)
3. Kresse G., Hafner J., Phys. Rev. B **47**, 558 (1993)
4. Perdew J.P., Wang Y., Phys. Rev. B **45**, 13244 (1992)

ДВУХФАЗНОЕ СОСТОЯНИЕ СОЕДИНЕНИЯ MgB_2

Блинова Ю.В.*, Кузнецова Е.И., Сударева С.В., Криницина Т.П., Акшенцев Ю.Н.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: jml1@imp.uran.ru

Соединение MgB_2 в настоящее время привлекает внимание исследователей по причине его возможного практического применения для получения высоких магнитных полей и создания электронных приборов. В перспективе MgB_2 может заменить традиционные сверхпроводники на основе сплавов ниобия, использующиеся при гелиевых температурах. Однако при изготовлении проводников с высокими критическими токами на основе MgB_2 существует ряд проблем. Так, при изготовлении сверхпроводящих композитов MgB_2/Cu методом «порошок в трубе» не всегда удастся обеспечить высокую плотность сверхпроводящей сердцевины и, следовательно, хороший контакт между зернами фазы MgB_2 . Пока трудно получить MgB_2 без примеси MgO из-за высокой способности магния к окислению. Трудности создает и более сильная по сравнению с бором летучесть магния при высоких температурах.

В настоящей работе исследованы структура и механизм образования соединения MgB_2 в массивных образцах, приготовленных методом твердофазного синтеза с разным соотношением $Mg : B$.

С помощью рентгенографии, просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии с микроанализом установлено, что во всех образцах в рамках одной гексагональной решетки MgB_2 фактически образуются две фазы со слегка отличными параметрами решетки. Одна фаза – плотная и твердая, состоит из кристалликов, хорошо прилегающих друг к другу, она содержит больше магния и бора и меньше примесного кислорода. Вторая фаза – рыхлая, состоит из кристалликов плохо связанных между собой (она частично выкрашивается во время приготовления шлифа), эта фаза содержит меньше магния и бора и в 4 раза больше кислорода. Такая двухфазная структура является результатом особого механизма образования соединения MgB_2 , включающего расплавление магния, растворение в нем твердого бора, последующую кристаллизацию из расплава соединения MgB_2 с образованием дендритоподобной структуры с соответствующим перераспределением компонентов.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ КОМПОЗИЦИОННОГО РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНОГО МАТЕРИАЛА

Бондаренко Ю.М.* , Матюхин П.В.

Белгородский государственный технологический университет им. В.Г. Шухова, г. Белгород, Россия

*E-mail: bgtu-bondarenko@yandex.ru

Композит представляет собой сложную многокомпонентную систему. Исследование комплексного влияния различных факторов этой системы на рельеф и структуру разрабатываемого композиционного материала целесообразно проводить, используя метод сканирующей атомно-силовой микроскопии (АСМ). Визуализация совместимости и однородной структуры матрицы с наполнителем, а также результата воздействия различных высокоэнергетических излучений на поверхностные слои композиционных радиационно-защитных материалов основана на зондировании поверхности полуконтактным методом в режиме топографии. Для изучения изменения структуры поверхности материала до и после активации-модификации составляющих системы, до и после воздействия γ -излучения, используются феноменологические характеристики, которые определены в терминах микрогеометрии и классической статистики [1]. Применяются следующие параметры, отражающие состояние рельефа всех видов поверхности:

1. S_z – десять точек по высоте:

$$S_z = 1/5 \left(\sum_{i=1}^5 z_{pi} + \sum_{i=1}^5 z_{vi} \right), \quad (1)$$

где z_{pi} – высота i -го наибольшего выступа профиля; z_{vi} – глубина i -й наибольшей впадины профиля.

2. S_a – среднеарифметическая шероховатость поверхности:

$$S_a = 1/N^2 \left(\sum_{i,j=1}^N |z_{ij} - z_{mean}| \right), \quad (2)$$

где $z_{mean} = 1/N^2 \sum_{i,j=1}^N z_{ij}$ – средняя высота точек выборки, N – объем выборки.

3. S_q – среднеквадратичная шероховатость поверхности:

$$S_q = 1/N^2 \left(\sum_{i,j=1}^N (z_{ij} - z_{mean})^2 \right)^{1/2}. \quad (3)$$

Данные параметры обрабатываются программным модулем для построения двух- и трехмерных изображений топографии поверхности. По этим параметрам можно судить о степени различия между двумя и более поверхностями [2].

На рис. 1 представлена топография поверхности металлокомпозиционного материала (матрица Д16Т; наполнитель – Fe_2O_3 и Vi_2O_3) до (а) и после (б) облучения ^{60}Co . При сравнении данных АСМ по всей области сканирования различия между z_{max} и z_{min} значением координаты Z до и после воздействия γ -квантов обусловлены увеличением в 2 раза геометрических размеров исследуемой поверхности после облучения. Таким образом, можно сделать вывод, что в структуре явных изменений не произошло, под воздействием радиоизотопа ^{60}Co материал стабилен по основным физико-механическим свойствам.

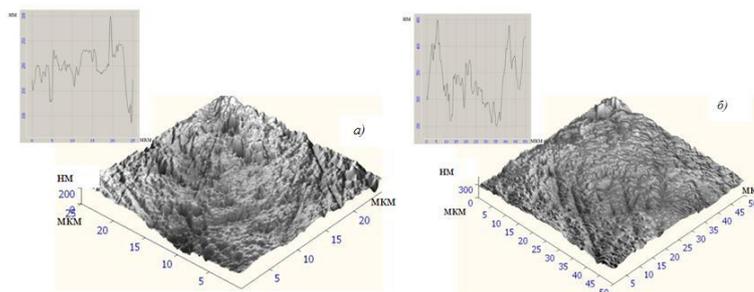


Рис. 1. Топография 3D поверхности металлокомпозиционного радиационно-защитного материала до (а) и после (б) облучения ^{60}Co .

1. Арутюнов П.А. и др., Заводская лаборатория. Диагностика материалов, **65**, 27 (1998)

2. Матюхин П.В. и др., Труды XXII Межд. конф. «Радиационная физика твердого тела», 91 (2012)

ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМ С ФРАКТАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ
НЕОДНОРОДНОСТЕЙ СУБМИКРОННОГО МАСШТАБА МЕТОДОМ СПИН-ЭХО
МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЙЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

Величко Е.В.^{1*}, Четвериков Ю.О.¹, Аксельрод Л.А.¹, Забенкин В.Н.¹, Kraan W.H.²,
Bouwman W.G.², Григорьев С.В.^{1,3}

¹Петербургский Институт Ядерной Физики НИЦ КИ, Гатчина, Россия

²Delft Technical University, Delft, the Netherlands

³Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: evgen.velichko@lns.pnpi.spb.ru

В работе показана возможность применения методики спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов (СЭМУРН) для изучения образцов фрактальной природы. В качестве исследуемых образцов были выбраны ксерогели аморфного диоксида циркония, являющиеся поверхностными фракталами, активированный уголь, являющийся объемным фракталом, и порошок известняка, не проявляющий фрактальных свойств. Предварительно образцы аттестовали на установках малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения.

Измерения производились на установках СЭМУРН ПИЯФ и SESANS Дельфтского технологического университета. В ходе эксперимента исследовались зависимости поляризации нейтронного пучка от так называемой спин-эхо длины – расстояния между точками образца в прямом пространстве. Величина спин-эхо длины менялась в диапазоне от 30 нм до 20 мкм. При каждом значении спин-эхо длины производилось два измерения поляризации нейтронного пучка: прошедшего через установку без рассеяния на образце и рассеянного образцом. Из отношения поляризации рассеянного пучка к поляризации падающего пучка получали величину приведенной поляризации – амплитуду спин-эхо сигнала.

В эксперименте были проведены измерения образцов одного состава разных толщин. Установлено, что корреляционная функция СЭМУРН не зависит от толщины образца, а многократное рассеяние на образце легко учитывается при анализе полученных данных. С ростом спин-эхо длины амплитуда спин-эхо сигнала выходит на некий уровень насыщения $0 < P_s < 1$.

При обработке результатов эксперимента из уровня насыщения P_s вычислялось полное сечение рассеяния, и приведенная поляризация пересчитывалась в корреляционную функцию СЭМУРН. Из аппроксимации корреляционных функций для разных типов образцов определены: тип фрактальной структуры, ее размерность и диапазон масштабов, в котором она существует. Из полученных результатов следует, что методика СЭМУРН является чувствительной техникой исследования объектов фрактальной природы.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 12-02-12066-офи_м и в рамках государственного контракта № 07.514.12.4003.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КАЛЬЦИЙ-ФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЙ, СФОРМИРОВАННЫХ ИЗ АБЛЯЦИОННОЙ ПЛАЗМЫ

Волокитина Т.Л.* , Твердохлебов С.И., Хайлов И.П.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

*E-mail: tatyanavolokitina@gmail.com

В настоящее время разработка технологий модифицирования поверхности материалов с целью увеличения их биоактивности является одним из перспективных направлений в области медицинского материаловедения. Для улучшения процесса остеогенеза костной ткани и фиксации металлических имплантатов на поверхность имплантатов наносят кальций-фосфатные (КФ) покрытия на основе гидроксиапатита (ГАП), являющегося основным компонентом костной ткани живых организмов. Одним из методов осаждения покрытий являются мощные ионные пучки (МИП) с энергией частиц $100 \div 1000$ кэВ, которые позволяют сохранять стехиометрический состав вещества мишени в осаждаемых покрытиях и обеспечивают их чистоту. В связи с этим актуально исследование свойств кальций-фосфатных покрытий, полученных МИП методом на имплантатах.

КФ покрытия были получены на подложках из титана VT1-0 синтезом из абляционной плазмы, создаваемой в результате облучения мишени из натурального и синтетического ГАП мощными ионными пучками наносекундной длительности за 100, 200 и 300 импульсов. Измерение толщины и шероховатости КФ покрытий проводилось профилометрическим методом на профилометре-профилографе "TALYSURF 5" с использованием подложек из полированного кремния. Физико-механические свойства осажденных покрытий изучались методом наноиндентирования на приборе «НаноСкан».

Результаты измерений свойств КФ покрытий, полученных МИП методом, представлены в таблице. При увеличении количества импульсов МИП наблюдается линейный рост толщины покрытия. Темп осаждения покрытия с синтетической мишенью составил 0.65 нм/импульс, а натуральной – 4 нм/импульс. Таким образом, мишень из натурального ГАП эродирована более интенсивно, чем керамическая. Данное обстоятельство обусловлено более пористой и развитой структурой мишени из натурального ГАП. КФ покрытия увеличивают шероховатость исходной подложки и, соответственно, площадь контакта биотканей с имплантатом, необходимую для остеосинтеза и улучшения прочности их соединения. Микротвердость полученных покрытий больше микротвердости титана и кортикальной кости. Значения модуля упругости покрытий находятся в диапазоне $6 \div 14$ ГПа, что соизмеримо с модулем упругости кортикальной кости (18 ГПа).

Подложка, ГАП (мишень)	Кол-во импульсов МИП	Толщина покрытия, мкм	Ra, мкм/класс шероховатости	Модуль упругости E, ГПа	Микротвердость H, ГПа
Ti, синтетический	300	0.25	0.73/11a	6.2 ± 0.3	3.5 ± 0.4
Ti, натуральный	300	1.2	0.54/11b	14.5 ± 1.3	5.0 ± 1.6
Подложка (Ti)			0.01/13b	110	~ 1
Кортикальная кость [1]			–	~ 18	0.51 ± 0.01

Исследованные свойства КФ покрытий на титановых подложках показывают возможность их применения в качестве покрытий на медицинских имплантатах, так как они удовлетворяют требованиям по микротвердости и значению модуля Юнга. Технология изготовления мишени из ГАП влияет на свойства КФ покрытий и темп их осаждения.

1. Cook W., J. Biomed. Mater. Res., **20**, 1 (1986)

НЕКОТОРЫЕ ДЕФЕКТЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПРЕДЫСТОРИИ НАПЛАВА КВАРЦЕВОГО СТЕКЛА

Волков П.В.* , Брызгалов А.Н., Ловчиков Д.В., Живулин Д.Е.

Челябинский государственный педагогический университет, г. Челябинск, Россия

*E-mail: peter-007@mail.ru

Несмотря на стремительное развитие спутниковых навигационных систем, неотъемлемой частью всех летательных аппаратов по-прежнему остаются автономные гироскопические приборы. За последние годы в гироскопии достигнуты значительные успехи. Одним из примеров является разработка твердотельного волнового гироскопа (ТВГ), в котором основной составляющий элемент – высокочастотный полусферический резонатор из кварцевого стекла.

Целью работы являлось выявление микроструктурных дефектов, получаемых в процессе стеклования кварцевого стекла КУ-1, снижающих акустическую добротность резонаторов.

Экспериментальные цилиндрические образцы кварцевого стекла диаметром 30 мм и толщиной 3 мм, обладающие всеми физическими характеристиками для достижения высокой резонансной частоты колебаний, были получены с различными скоростями охлаждения:

1. Образец на рис. 1а был получен при режиме стеклования: $T = 1600^{\circ}\text{C}$, $t = 1$ час при скорости охлаждения $10^{\circ}\text{C}/\text{мин}$.

2. Образец на рис. 1б был получен при режиме стеклования: $T = 1300^{\circ}\text{C}$, $t = 1$ час при скорости охлаждения $5^{\circ}\text{C}/\text{мин}$.

Исследования проводились методами оптической микроскопии с использованием микроинтерферометра Линника МИИ-4М и химическим травлением в водном растворе NH_4F с применением ультразвука и повышением температуры до 40°C .

Основной дефект процесса стеклования заключается в наличии пузырей – небольших полостей, заполненных различными газами (рис. 1б). В большинстве случаев эти газы унаследованы стеклом из кварцевых концентратов, где их источником служат газо-жидкие включения, а также углеродсодержащие примеси.

Для снижения их концентрации и получения высокопрочной мелкоячеистой субструктуры рекомендуется использование следующих параметров начальной температуры и времени стеклования:

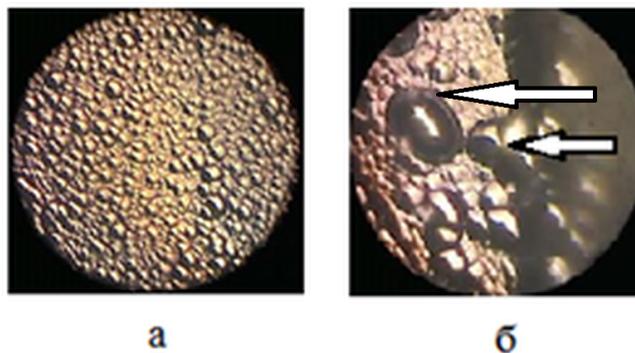


Рис. 1. Субструктура кварцевых стекол после химического травления, наплавленных с разной начальной температурой стеклования ($\times 500$): а – совершенная субструктура, б – субструктура с наличием газовых включений.

Температура, $^{\circ}\text{C}$	1160	1200	1500	1600
Время	6 дней	3 дня	2 часа	1 час

Работа выполнена при поддержке Гранта Правительства Челябинской области.

ИЗМЕНЕНИЕ ОРИЕНТИРОВКИ, СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ МОЛИБДЕНА
ПРИ ХОЛОДНОЙ И НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Гапонцева Т.М.*, Пилюгин В.П., Дегтярев М.В., Воронова Л.М., Чашухина Т.И., Пацелов А.М.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: tmt@mail.ru

Представляло интерес проследить изменение структуры, конечной ориентировки и свойств в зависимости от температуры деформации молибдена и проследить, приведет ли снижение температуры к двойникованию.

Исследовали монокристаллический молибден двух ориентировок, деформированный в наковальнях Бриджмена под давлением 12 ГПа при 80 и 300 К. Образцы до деформации имели диаметр 5 мм и толщину 0.3 мм. Угол поворота наковальни варьировали от 0° до 10 оборотов. Для 300 К степень деформации изменялась в интервале от 0.2 до 9.6 и для 80 К – от 0.3 до 7.3. Твердость измеряли на приборе ПМТ-3 при нагрузке 50 Н. Структуру исследовали методом электронной микроскопии.

Выяснили, что поведение твердости молибдена не зависело от начальной ориентировки, но зависело от температуры деформации. На кривой твердости выделили две стадии деформации. Интенсивность упрочнения резко возрастает при температуре деформации 300 К по достижении $e = 8.5$, а в ходе деформации при 80 К после значительно меньшей степени $e = 2.8$.

Электронно-микроскопические исследования показали, что на начальных этапах деформации при 300 К происходит фрагментация монокристалла, наблюдаются узкие дислокационные границы, а на дифракциях – азимутальное разделение рефлексов. При понижении температуры деформации формируется слаборазориентированная ячеистая структура и полосы сдвига, но образования двойников деформации, как в железе или никеле, деформированных при 80 К, не обнаружили. В ходе дальнейшей деформации происходит фрагментация внутри полосовых структур, сопровождающаяся резким измельчением, что соответствует переходу деформации при 80 К на вторую стадию. При продолжении деформации на этой стадии новые полосовые структуры не образуются.

При продолжении деформации при обеих температурах наблюдается постепенное измельчение элементов структуры и увеличение доли микрокристаллитов. Однако даже после максимально достигнутой степени деформации структура остается неоднородной: наряду с разориентированными микрокристаллитами сохраняются элементы с малоугловыми разориентировками.

Таким образом, в молибдене, обладающем высоким значением ЭДУ, понижение температуры деформирования до 80 К не приводит к смене механизма деформации с дислокационного скольжения на двойникование. В зависимости от типа Холла-Петча показатель степени при d (-1) указывает на то, что в структуре, сформированной при 80 К, большинство границ малоугловые, в тот время как при 300 К преобладают высокоугловые границы, показатель степени близок к -0.5 . При деформации наблюдается быстрое разрушение исходной ориентировки при обеих температурах. После низкотемпературной деформации преобладает ориентировка (310).

Работа выполнена по бюджетной теме «Структура» № г.р. 01201064335 и при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ 11-03-00401 и проекта Президиума РАН № 12-П-2-1053.

Электронно-микроскопическое исследование выполнено в ЦКПЭМ ИФМ УрО РАН.

ОБРАЗОВАНИЕ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ С ПОСЛЕДУЮЩИМ УПОРЯДОЧЕНИЕМ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ Cu – Pd

Гохфельд Н.В.* , Буйнова Л.Н., Пушин В.Г., Пилюгин В.П., Коуров Н.И.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

В работе создано и исследовано нанокристаллическое состояние в исходных атомноупорядоченных сплавах $\text{Cu}_{75}\text{Pd}_{25}$ и $\text{Cu}_{72}\text{Pd}_{28}$ с периодической структурой. Нанокристаллическая структура получена под воздействием мегапластической деформации кручением (МПДК) при высоком квазигидростатическом давлении. Это сопровождается полным нарушением дальнего порядка в сплавах. При последующих отжигах при разной температуре и времени выдержки получено упорядоченное состояние сплавов. Электронномикроскопическое исследование всех изучаемых сплавов проводили в исходном упорядоченном состоянии после применения МПДК и последующих отжигов. Анализ структуры показал, что исходный размер зерен в медно-палладиевых сплавах после рекристаллизационного отжига составлял 100 мкм. Для создания полного дальнего порядка образцы охлаждали в интервале температур 420 – 270°C со скоростью 2 град./сут. Изучение исходного упорядоченного состояния показало, что в сплаве содержатся периодические границы. Последнее подтвердилось соответствующим расщеплением сверхструктурных рефлексов и наличием крупных С-доменов. После МПДК на 15 оборотов при $P = 8$ ГПа наименьший размер зерен и их высокая однородность достигались в обоих сплавах. На электронограммах наблюдались только кольцевые отражения. Показано, что при последующих изотермических отжигах, начиная с 450°C, в сплаве $\text{Cu}_{75}\text{Pd}_{25}$ при малом размере зерна интенсивно протекали процессы упорядочения (рис. 1).

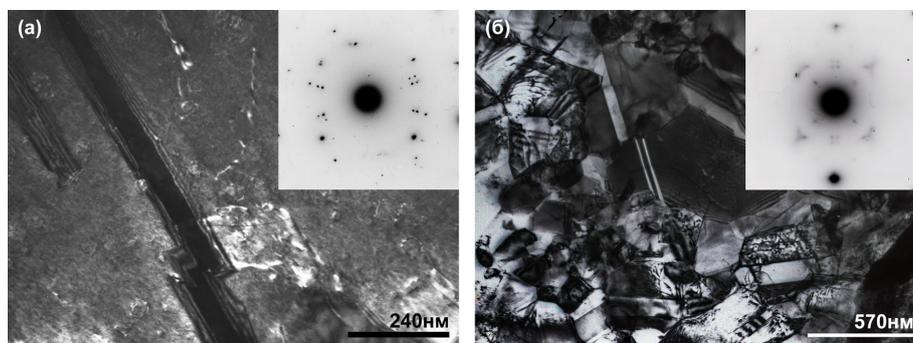


Рис. 1. Микроструктура МПДК-сплавов системы Cu–Pd после отжига; (а) – сплав $\text{Cu}_{75}\text{Pd}_{25}$ (450°C, 24 ч); (б) – сплав $\text{Cu}_{72}\text{Pd}_{28}$ (450°C, 1 ч).

В сплаве $\text{Cu}_{72}\text{Pd}_{28}$ процессы упорядочения шли более вяло. Анализ кривых электросопротивления всех исследованных сплавов показал, что низкие значения электросопротивления, соответствующие хорошо упорядоченному состоянию, сменялись более высокими значениями при разупорядочении. Исследование микротвердости показало, что механические свойства сплавов в разупорядоченном состоянии ниже, чем в упорядоченном. Показано, что создание атомного порядка в мелкозернистом сплаве улучшает механические свойства сплава, что важно с точки зрения использования изучаемого сплава в качестве электроконтактного материала. В сплавах $\text{Cu}_{75}\text{Pd}_{25}$ обнаружен гигантский эффект ускорения кинетики упорядочения более чем в тысячу раз в условиях сохранения высокой прочности наноструктурного состояния зерен в сплавах.

Проект программы фундаментальных исследований УрО РАН № 12-И-2-2011.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПУТЕЙ СНИЖЕНИЯ ПОТРЕБЛЯЕМОЙ МОЩНОСТИ СЕНСОРОВ СО НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ОЛОВА

Максимова Н.К., Сергейченко Н.В., Дробот А.В.*

Томский государственный университет, г. Томск, Россия

*E-mail: albina114@yandex.ru

В настоящее время в различных отраслях промышленности все более широкое применение находят датчики, способные определять концентрацию большого набора газов. Особый интерес представляют газовые пожарные извещатели на основе тонких пленок диоксида олова. Однако такие датчики отличаются высокой потребляемой мощностью. Показано, что, используя режим термоциклирования, можно увеличить отклик на низкие концентрации СО, а также снизить потребляемую мощность.

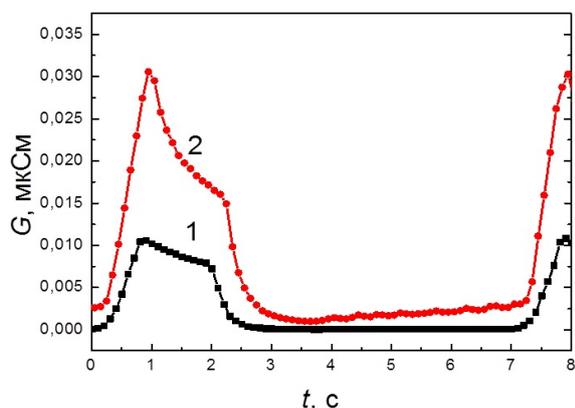


Рис. 1. Профиль проводимость-время при нагреве до температуры 683 К (2 с) и охлаждении до 353 К (5 с); 1 – в чистом воздухе, 2 – при подаче СО.

В настоящей работе были изучены особенности адсорбционного отклика на СО сенсоров на основе тонких пленок диоксида олова при термоциклировании с целью снижения потребляемой мощности. Сначала был выбран следующий режим: нагрев до 683 К (2 с) и охлаждение до 353 К (5 с). Характер профилей проводимость-время (рисунок 1) соответствует температурной зависимости проводимости сенсоров в режиме постоянного нагрева. Можно предположить, что в цикле охлаждения преобладает адсорбция и окисление молекул СО, проводимость увеличивается. При нагреве преобладающей становится десорбция СО₂ и хемосорбция кислорода О⁻, наблюдается резкое снижение проводимости.

Далее были сопоставлены концентрационные зависимости отклика сенсоров СО при постоянном нагреве и в режиме термоциклирования. Установлено, что отклик в конце цикла охлаждения в несколько раз превышает отклик в конце цикла нагрева и в режиме постоянного нагрева.

Для снижения потребляемой мощности далее были рассмотрены профили проводимость-время сенсоров при увеличении длительности цикла охлаждения. Было установлено, что наблюдается снижение значений отклика при увеличении длительности цикла охлаждения, но при этом величина потребляемой сенсором мощности значительно снижается. Показано, что в случае длительности охлаждения 64 с значения отклика сравнимы с этими значениями в режиме постоянного нагрева, но даже таких значений отклика достаточно для детектирования низких концентраций СО, при этом в 6 раз снижается потребляемая мощность.

Таким образом, использование режима термоциклирования при нагреве до 683 К в течение 2 с и охлаждении до 353 К в течение 5 с способствует существенному повышению отклика сенсоров на низкие концентрации СО, а снижения потребляемой сенсором мощности можно достичь путем увеличения длительности цикла охлаждения.

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА НОВЫХ ХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ТИПА M_7X_8

Ибрахим П.Н.Г.^{1*}, Селезнёва Н.В.¹, Баранов Н.В.^{1,2}

¹Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, ИЕН, г. Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: peteribrahim@yandex.ru

Соединения типа M_7X_8 ($M = Fe, Co, X = S, Se$) обладают слоистой структурой типа NiAs с вакансиями в катионной подрешетке. Соединения Fe_7S_8 и Fe_7Se_8 являются ферромагнетиками с критическими температурами около 600 К и 480 К соответственно [1, 2], однако соединения Co_7S_8 и Co_7Se_8 являются парамагнетиками Паули. Исследования квазибинарных соединений $(Fe_{1-x}Co_x)_7S_8$ и $(Fe_{1-x}Co_x)_7Se_8$ показали, что температура Кюри уменьшается с ростом содержания кобальта (x), и ферромагнетизм исчезает при критическом составе $x_c \approx 0.6$ [3, 4]. В качестве причины такого поведения рассматривают делокализацию $3d$ электронов в результате уменьшения межслоевого расстояния при замещении, так как параметр c соединений Co_7S_8 и Co_7Se_8 примерно на 10 % меньше, чем параметр c соединений Fe_7S_8 и Fe_7Se_8 . Учитывая, что теллур обладает большим ионным радиусом, по сравнению с селеном, можно ожидать, что замещение селена теллуром в соединениях $(Fe_{1-x}Co_x)_7Se_8$ приведет к значительным изменениям магнитного состояния.

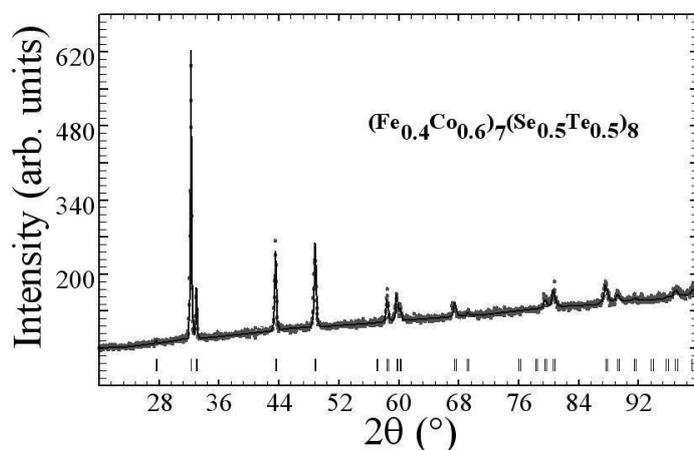


Рис. 1. Дифрактограмма образца $(Fe_{0.4}Co_{0.6})_7(Se_{0.5}Te_{0.5})_8$. Символы – эксперимент, сплошная линия – расчет. Штрихи указывают положение рефлексов.

Так как в литературе отсутствуют данные о существовании соединений кобальта и железа с теллуром типа M_7X_8 , то целью настоящей работы являлось получение соединений $(Fe_{1-x}Co_x)_7(Se_{1-y}Te_y)_8$, выполнение их кристаллохимической аттестации с целью дальнейшего изучения их магнитных и транспортных свойств. Синтез соединений выполнялся методом твердофазных реакций, аттестация образцов проводилась с помощью дифрактометра Брукер D8 ADVANCE. Установлено, что используемая методика синтеза позволяет получать однофазные образцы с концентрацией теллура до $y = 0.5$. В качестве примера на рисунке 1 показана дифрактограмма образца $(Fe_{0.4}Co_{0.6})_7(Se_{0.5}Te_{0.5})_8$.

Это соединение кристаллизуется в гексагональной структуре типа NiAs (пространственная группа $P63/mmc$) с параметрами решётки $a = 3.729 \text{ \AA}$, $c = 5.429 \text{ \AA}$. Установлено, что замещение селена теллуром приводит к росту параметра a , в то время как параметр c изменяется слабо.

1. Wang H. and Salveson I., Phase transition **78**, 547 (2005)
2. Andresen A.F. and Ieciejewicz J., Le journal de physique **25**, 574 (1964)
3. Sato M., Kamimura T. et al., J. Magn. Magn. Mat. **90&91**, 179 (1990)
4. Sato M., Kamimura T. et al., Journal of applied physics **57**, 3244 (1985)

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ТРОИЛИТА FeS МЕТЕОРИТНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

Камаева Ю.А*, Чукин А.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: shket.kropa@mail.ru

Преобладающая часть находок минерала троилит (FeS) на Земле имеет метеоритное происхождение. Метеориты, найденные в разных местах, представляют большую ценность для науки, так как являются неземными телами, доступными для анализа и исследования. Анализ состава, структуры, физических свойств образцов дает возможность расшифровать историю возникновения метеоритов, установить их возраст, выявить изменения, которым они подвергались под влиянием космической радиации, и выяснить характер изменений, происходящих в них во время падения на Землю.

При различных внешних условиях сульфид железа состава близкого к стехиометрическому может кристаллизоваться в нескольких формах: гексагональной ($P63/mmc$, $P63mc$), тетрагональной ($P4/nmm$), орторомбической ($Pnma$) и моноклинной ($P21/a$) [1]. При этом различные кристаллические модификации моносульфида железа могут обладать небольшим дефицитом катионов в элементарной кристаллической ячейке. Это происходит вследствие того, что при кристаллизации часть ионов Fe^{2+} , Fe^{2+} заменяется ионами Fe^{3+} по схеме $3Fe^{2+} \rightarrow 2Fe^{3+} + V$, где (V – вакансия) [2]. При этом в решетке возникает дефектная структура. В результате мы можем записать состав моносульфида железа как $Fe_{1-x}S$.

В настоящей работе мы используем методы рентгеновской дифракции для определения структурных особенностей порошка троилита (FeS) метеоритного происхождения и оценки дефектности кристаллической решетки этого образца.

Съемка дифрактограмм (рис. 1) проводилась на дифрактометре Xpert Pro MPD (Голландия) с твердотельным пиксельным детектором с шириной активной зоны 3.345 градуса. Обработка дифрактограммы методом полнопрофильного анализа Ритвельда показала, что образец обладает гексагональной сверхструктурой к типу NiAs с пространственной группой $P-62c$ № 190 и параметрами: $a = 5.95565(10) \text{ \AA}$, $c = 11.72679(43) \text{ \AA}$. Отклонение от стехиометрического состава обнаружено на уровне: $x = 0.08$. Величина полученного отклонения в настоящий момент проходит подтверждение в экспериментах по мёссбауэровской спектроскопии.

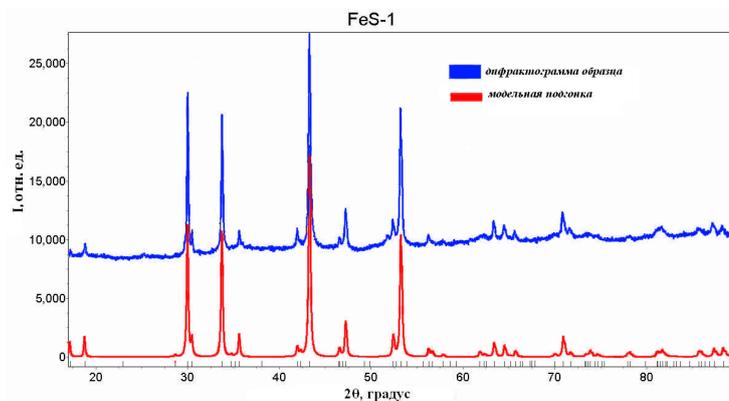


Рис. 1. Дифрактограмма исследуемого образца.

1. Barker W.W. and Parks T.C., *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **50**, 2185-2194 (1986)
2. Kruse O., *American Mineralogist*, **75**, 755-763 (1990)

МОДЕЛЬ АТОМНОЙ ДИФФУЗИИ В СТРУКТУРНО НЕОДНОРОДНЫХ ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЕ К НАНО- И СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИМ МАТЕРИАЛАМ

Кесарев А.Г.*, Кондратьев В.В., Ломаев И.Л.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: kesarev@bk.ru

Развиты представления о процессе низкотемпературной зернограничной диффузии, базирующиеся на моделях структурно неоднородных границ и многопутевой диффузии. Выявлен физический смысл эффективных коэффициентов зернограничной диффузии для непрерывного и дискретного распределения энергий активации. Наблюдаемые особенности коэффициента зернограничной диффузии в этих материалах, такие как низкая энергия активации и малый предэкспоненциальный множитель, объяснены неоднородностью границ зерен, когда массоперенос осуществляется по отдельным (активным) диффузионным путям с пониженной энергией активации, доля которых мала, при активном стоке диффузанта в остальные области границы. В зависимости от продолжительности диффузионного отжига удельные концентрации диффузанта в различных диффузионных путях могут отличаться друг от друга, либо совпадать, когда достигается режим диффузионного перемешивания между путями. В последнем случае неоднородная граница характеризуется эффективным (усредненным) коэффициентом диффузии, который и определяется при обработке диффузионных данных. При отсутствии диффузионного перемешивания описание зернограничной диффузии в рамках стандартной модели Фишера является некорректным.

Представлены результаты оригинальной обработки имеющихся диффузионных данных для ряда металлов с субмикрокристаллической (СМК) структурой [1–3]. Получены оценки энергии активации диффузионного скачка по обычным границам и по активным диффузионным путям, а также доля активных диффузионных путей. Последняя оказалась очень мала $\sim 10^{-4} - 10^{-5}$ для всех имеющихся данных как в случае модели дискретного, так и непрерывного распределения парциальных энергий. Сделано предположение, что в этих материалах наиболее вероятным при пониженных температурах является массоперенос по тройным стыкам зерен.

Работа выполнена по плану РАН – шифр “Структура” № г.р. 01.02.006.13392 и при частичной поддержке УрО РАН: проект № 12-У-2-1004.

1. Грабовецкая Г.П., Раточка И.В., Колобов Ю.Р., Пучкарева М.Н., ФММ., **83**, 112 (1997)
2. Грабовецкая Г.П., Мишин И.П., Раточка И.В., Псахье С.Г., Колобов Ю.Р., Письма в ЖТФ, **34**, 1 (2008)
3. Колобов Ю.Р., Липницкий А.Г., Неласов И.В., Грабовецкая Г.П., Известия ВУЗов. Физика, **51**, 47 (2008)

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ РАСПАДА АУСТЕНИТА НА МОРФОЛОГИЮ БЕЙНИТА
И СВОЙСТВА ТРУБНОЙ СТАЛИ КЛАССА ПРОЧНОСТИ Х90
ПОСЛЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

Клюева С.Ю., Счастливец В.М., Табатчикова Т.И.* , Яковлева И.Л.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Существенное повышение комплекса механических свойств штрипсовых сталей в условиях ограничения значений углеродного эквивалента может быть достигнуто совершенствованием технологии термической и термомеханической обработок. Прокат, предназначенный для строительства магистральных трубопроводов, эксплуатирующихся в сложных климатических условиях, должен иметь и высокую прочность и хорошую хладостойкость. Одновременное повышение прочности и хладостойкости низкоуглеродистых низколегированных сталей может быть достигнуто за счет создания высокодисперсной фрагментированной структуры. Целью данной работы являлось определение зависимости морфологии бейнитной структуры, формирующейся в штрипсовой стали класса прочности Х90, от температуры изотермического $\gamma \rightarrow \alpha$ -превращения. Особое внимание уделялось особенностям бейнитной структуры, сформировавшейся в исследуемой стали после термомеханической обработки.

Подробно рассмотрены особенности структуры бейнита низкоуглеродистой низколегированной стали 07Г2НДМБТ, полученного при изотермическом распаде аустенита: величина кристаллов, их взаимная ориентация, наличие выделений цементита. Определен температурный интервал формирования бейнита с субзерненным строением. Установлено, что морфология бейнита, образующегося в стали 07Г2НДМБТ при изотермическом распаде переохлажденного аустенита при температурах 550 и 500°C, отличается развитым субзерненным строением, что способствует получению высоких механических свойств. Бейнитное превращение при температуре 600°C, осуществленное в изотермических условиях, не происходит до конца, остаточный аустенит распадается с образованием реечного мартенсита или нижнего бейнита. Распад переохлажденного аустенита при температуре 450°C приводит к образованию бейнита с грубым строением кристаллов α -фазы и выделениями крупных частиц цементита.

Установлено влияние размера аустенитного зерна и степени горячей деформации на происходящее при последующем охлаждении бейнитное превращение и субмикроструктурное строение бейнита. Показано, что термомеханическая обработка низкоуглеродистых низколегированных сталей, заключающаяся в горячей деформации аустенита с крупным нерекристаллизованным зерном и последующем ускоренном охлаждении, позволяет увеличить полноту бейнитного превращения и повысить объемную долю бейнита с субзерненным строением.

Методами металлографии и просвечивающей электронной микроскопии исследована структура листового проката из трубной стали класса Х90, произведенного по технологии двухстадийной термомеханической обработки с ускоренным охлаждением до заданной температуры (ТМО). Структура кристаллов α -фазы бейнита в сталях, подвергнутых ТМО, характеризуется субзерненным строением и повышенной плотностью дислокаций, что связано не только с развитием фазового $\gamma \rightarrow \alpha$ -превращения в области температур, обеспечивающих формирование фрагментированной бейнитной структуры (550 – 500°C), но и с передачей дислокационной структуры, приобретенной аустенитом при горячей деформации, конечной бейнитной структуре. Эти особенности структуры бейнита определяют высокую прочность и хладостойкость данного класса сталей.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ 10-02-96010-р_Урал_а, а также проектов № 12-П-2-1030 и № 12-2-020-ЧТЗ.

ЕАМ ПОТЕНЦИАЛЫ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ СИСТЕМЫ Ti – H

Костоусова Т.А.^{1*}, Яковенкова Л.И.²¹Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*E-mail: tati.kosto@gmail.com

Интерес к изучению взаимодействия водорода с металлами непрерывно растет по многим причинам, одной из которых является использование системы металл-водород на практике, например сохранение водорода в водородной энергетике. Также интерес вызывает влияние водорода на процессы охрупчивания конструкционных материалов, к которым относятся титан и его сплавы. Безусловно, важным является понимание фундаментальных аспектов водородного охрупчивания и водородного транспорта, которые зависят от двух типов взаимодействий: закрепления водорода вновь образованными дислокациями и переноса водорода движущимися дислокациями. Поэтому изучение взаимодействия водорода с дислокациями в Ti представляет несомненный интерес.

Молекулярно-динамическое моделирование является полезным инструментом для исследования структуры и свойств дефектов в изучении этих проблем. Важным моментом при молекулярно-динамическом моделировании является выбор потенциалов межатомного взаимодействия для системы Ti – H, адекватно описывающих основные свойства материала.

В настоящей работе для проведения молекулярно-динамических расчетов в XMD пакете были использованы полуэмпирические потенциалы межатомного взаимодействия Ti – Ti, H – H, Ti – H, построенные методом погруженного атома (ЕАМ – «Embedded Atom Method»). В этом методе потенциальная энергия кристалла записывается в виде:

$$E = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Phi_i(r_{ij});$$

$$\rho_i = \sum_{i \neq j} f(r_{ij}),$$

где $\Phi_i(r_{ij})$ – парный потенциал межатомного взаимодействия; ρ_i – электронная плотность в узле i , создаваемая другими атомами; $F_i(\rho_i)$ – энергия внедрения атома i в электронную жидкость с плотностью ρ_i ; $f(r_{ij})$ – собственная электронная плотность j -го атома как функция расстояния r_{ij} между атомами i и j .

Параметры потенциалов взаимодействия атомов Ti – Ti и Ti – H взяты из [1], для атомов H – H из [2]. Получены аналитические выражения для модулей упругости C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{66} , C_{44} для кристаллов с ГПУ решеткой в условиях равновесия и вычислены их значения с использованием ЕАМ потенциалов межатомного взаимодействия. Значение объемного модуля для ГПУ кристаллов $B = \frac{1}{9}(2C_{11} + C_{33} + 2C_{12} + 4C_{31})$ получено также с использованием XMD пакета для молекулярно-динамического моделирования. Показано хорошее согласие модулей упругости с их экспериментальными значениями.

1. Ruda M., Farkas D., Abriata J., Phys. Rev. B **50**, 9765 (1996)2. Daw M.S. and Baskes M.I., Phys. Rev. B **29**, 6443 (1984)

ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ
АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ 10X23H18, КОНТАКТИРУЮЩЕЙ С La – Sr – Mn – O
ЭЛЕКТРОЛИТОМ ПРИ 950°C

Красноперова Ю.Г.^{1*}, Покрышкина Д.К.¹, Дегтярев М.В.¹, Чухарев В.Ф.²,
Чащухина Т.И.¹, Воронова Л.М.¹

¹)Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²)Российский федеральный ядерный центр – ВНИИТФ, г. Снежинск, Россия

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

Исследовано изменение структуры и перераспределение легирующих элементов в аустенитной стали 10X23H18 после работы при 950°C в течение 8800 часов в контакте с La–Sr–Mn–O электролитом с целью установления причин деградации поверхностного слоя токового коллектора твердооксидного топливного элемента (ТОТЭ) при длительной эксплуатации.

Методом сканирующей электронной микроскопии и анализа спектров рассеяния энергии на приборе QUANTA-200 Philips с ускоряющим напряжением 30 кВ получили данные о морфологии, толщине и составе оксидных слоев и перераспределении легирующих элементов в стали. Глубина зондирования составляла 1 мкм. Методом электронной просвечивающей микроскопии на приборе JEM-200CX изучали тонкую структуру материала на расстоянии 0.5 мм от наружной поверхности.

В исходном состоянии в стали обнаружены частицы карбонитридов титана ограниченной формы и частицы, содержащие Fe, C и O в количестве, превышающем среднее значение в сплаве (карбиды или оксиды железа). Карты рассеяния энергии показывают, что все остальные элементы (Cr, Co, Mn, Ni, Si, Al) распределены по образцу равномерно. По данным просвечивающей электронной микроскопии карбонитриды титана имеют размер порядка нескольких мкм, а карбиды хрома присутствуют в виде ориентированных выделений размером в доли микрона и методом сканирующей микроскопии не разрешаются.

После работы при 950°C в течение 8800 часов на поверхности стали образовалась плотная пленка оксида хрома Cr₂O₃ толщиной 10 – 15 мкм, на внешнем слое которой наблюдается повышенная концентрация Mn. Возможно, Mn осаждается из электролита или диффундирует из стали. Образовавшийся поверхностный слой MnCr₂O₄ имеет вид «щетки» и подобен защитному покрытию из Mn–Co-шпинели, который специально наносится на токовые элементы из ферритных сталей. Формирование шпинели является термодинамически предпочтительным, поскольку диффузия ионов марганца намного быстрее, чем ионов хрома в Cr₂O₃. Образование шпинели носит положительный характер, так как предотвращает испарение хрома и увеличивает электрическую проводимость слоя.

Под пленкой оксида хрома образовался рыхлый пористый слой толщиной 10 мкм, в котором на границах пор повышена концентрация Si и O, а глубже по сечению наблюдаются полунепрерывные пленочные выделения оксида кремния по границам зерен стали. Такие выделения распространяются на глубину до 50 мкм. Также по границам выделяются частицы оксида алюминия. В ферритных нержавеющей сталях образование непрерывного слоя оксидов Al и Si вследствие его низкой электрической проводимости ведет к нежелательному увеличению контактного сопротивления.

Перераспределение легирующих элементов стали в процессе работы в течение 8800 часов происходит на глубине до 200 мкм. Диффузия хрома, углерода и азота к поверхности приводит к образованию слоя с пониженным содержанием частиц (карбидов и карбонитридов).

Работа выполнена по теме «Структура» № г.р. 01201064335 и при частичной финансовой поддержке проекта УрО РАН № 12-У-2-1017. Электронно-микроскопическое исследование выполнено в ЦКПЭМ ИФМ УрО РАН.

КИНЕТИКА РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ НИКЕЛЯ СО СТРУКТУРОЙ РАЗЛИЧНОГО ТИПА, ПОЛУЧЕННОЙ ПРИ СДВИГЕ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Красноперова Ю.Г.^{1*}, Дегтярев М.В.¹, Чащухина Т.И.¹, Воронова Л.М.², Реснина Н.Н.²

¹)Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²)Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия

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

Первичная рекристаллизация субмикроструктурной (СМК) структуры, сформированной в условиях наклепа (в железе и конструкционных сталях), протекает необычным образом – по кинетике нормального роста. В результате образуется субмикрозернистая (СМЗ) рекристаллизованная структура сотового типа, наиболее устойчивая к росту зерна при нагреве. Это открывает новую перспективу создания высокопрочных конструкционных материалов. Целью данной работы было исследовать возможность получения СМЗ-структуры при низкотемпературной рекристаллизации СМК-структуры, сформированной в условиях динамического возврата, на примере никеля.

Образцы монокристаллического (111) никеля чистотой 99.98 % деформировали методом «сдвиг под давлением» в наковальнях Бриджмена при $T = 300$ К с углами поворота наковальни 15, 180 градусов и 2, 5, 7 и 10 оборотов. Поверхность образцов была параллельна плоскости {111}. После деформации образцы нагревали в кипящей воде при 100°C и в печи при 150°C с выдержкой 1, 8, 10, 32 и 64 часа; в печи при 250°C – 10, 30 мин, 1, 4 часа и при 350°C – 5, 10 и 30 мин, 1 час. Структуру исследовали металлографическим и электронномикроскопическим методами на расстоянии 1.5 мм от центра образца. Размеры рекристаллизованных зерен определяли методом секущих. Для определения запасенной энергии деформации использовали дифференциальную сканирующую калориметрию (ДСК).

Низкотемпературная рекристаллизация при 100 и 150°C развивается в никеле со структурой смешанного типа и СМК-структурой. В обоих случаях наблюдается рост отдельных центров рекристаллизации, а доля рекристаллизованной структуры за 64 часа не превышает 10 %. Повышение температуры до 250 и 350°C не меняет кинетику первичной рекристаллизации. Закон нормального роста на стадии первичной рекристаллизации СМК-структуры никеля (обнаруженный в железе с СМК-структурой) не выполняется. Преимущество в росте, получаемое отдельными зёрнами, возможно связано с протеканием динамического возврата при деформации. Увеличение степени деформации никеля на стадии СМК-структуры не оказывает влияние на кинетику рекристаллизации, что свидетельствует о выходе деформации на установившуюся стадию.

Калориметрические исследования показали, что наибольшая запасенная энергия деформации соответствует началу стадии СМК-структуры, а при продолжении деформации снижается и в дальнейшем остается постоянной, что свидетельствует о рассеянии энергии деформации за счет динамического возврата.

Определение температурно-скоростных условий деформации на основании значений энергии активации движения границы, полученных из эксперимента, подтвердило определяющее значение динамического возврата при большой пластической деформации никеля.

При низкотемпературной рекристаллизации формирование в чистом никеле СМК-структуры при деформации не обеспечивает изменение кинетики рекристаллизации. Вследствие этого создание однородной субмикрозернистой структуры в никеле невозможно.

Работа выполнена по теме «Структура» № г.р. 01201064335 и при частичной финансовой поддержке программы Уральского отделения РАН № 12-П-2-1015 и проекта РФФИ № 11-03-00401. Электронно-микроскопическое исследование выполнено в ЦКПЭМ ИФМ УрО РАН.

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ И ОТЖИГА НА СВОЙСТВА ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА Э110 (Zr – 1%Nb)

Кривошеина В.В. *, Пушилина Н.С., Лидер А.М.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

*E-mail: Sunny_day@sibmail.com

Циркониевые сплавы обладают рядом важных физико-механических свойств, которые позволяют использовать их в различных областях науки и техники. В процессе эксплуатации изделия из циркония подвергаются наводороживанию. Поглощенный водород, выделяясь в виде хрупкой гидридной фазы, резко ухудшает механические свойства материалов (водородное охрупчивание). Исключить проникновение водорода в материалы не удастся из-за большого содержания водорода в атмосфере и водной среде, а также по техническим условиям эксплуатации материалов [1].

Одним из путей решения проблемы проникновения водорода в металлы является создание защитных или барьерных покрытий на поверхности материала. Одним из перспективных методов модификации поверхности является использование концентрированных потоков энергии, в частности импульсных электронных пучков [2]. При таком воздействии создаются условия для образования в поверхностном слое аморфных, нано- и субмикроструктур, что в свою очередь может приводить к улучшению физико-механических свойств материала. В работе [2] установлено, что воздействие импульсного электронного пучка на сплав Э110 приводит к образованию мартенситной структуры в поверхностном слое материала. Такая структура обладает высокой твердостью и износостойкостью, но характеризуется высокими внутренними напряжениями. В то же время такое состояние может быть использовано как исходное при создании оптимального структурно-фазового состояния сплава Zr – 1%Nb посредством проведения последующей термической обработки. В настоящей работе исследовано влияние импульсного электронного облучения (ИЭП) и отжига на свойства циркониевого сплава Zr – 1%Nb.

Результаты исследования показали, что после облучения образцов из циркония происходит снижение скорости сорбции водорода с $2.6 \cdot 10^{-4}$ до $1.2 \cdot 10^{-4}$ см³ H₂/(с·см²). После отжига наблюдается сложная зависимость изменения скорости сорбции. У образцов после облучения наблюдается увеличение микротвердости на ~ 50 %, по сравнению с исходным образцом. У отожженных облученных ИЭП образцов при малой нагрузке (0.4 Н) происходит увеличение микротвердости ~ 48 %.

1. Иванова С.В., Шиков А.К., Бочаров О.В., *Металловедение и термическая обработка металлов*, **8**, 40 (2003)
2. Чернов И.П., Иванова С.В., Крёнинг Х.М., Коваль Н.Н., Ларионов В.В., Лидер А.М., Пушилина Н.С., Степанов Е.Н., Степанова О.М., Черданцев Ю.П., *Журнал технической физики*, **82**, 81 (2012)

МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛИТОГО МАГНИЯ

Кругликов Н.А.* , Ключкин И.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: nick@imp.uran.ru

Магний является одним из перспективных материалов современной металлургии. В отличие от другого широко распространённого лёгкого металла: алюминия, магний вне сплавов применяется редко из-за низких характеристик конструкционной прочности и коррозионной стойкости. Магний обладает ГПУ решёткой, поэтому создаются предпосылки для формирования анизотропии свойств в литом и деформированном состояниях. Авторы работ [1,2] показали, что механические характеристики чистого магния в монокристаллическом состоянии имеют сильную зависимость от кристаллографической ориентировки образца. Такая зависимость при наличии крупнозернистой ориентированной структуры может приводить к дополнительным издержкам. В частности, предел текучести при неблагоприятных ориентировках может достигать при комнатной температуре значений около 200 МПа, в то время как при ориентировке благоприятной для базисного скольжения и двойникования может оказаться на уровне 10 МПа (причём теоретическое критическое напряжение сдвига может иметь и меньшее значение) [2].

Ранее нами было показано, что образцы литого магния, при холодной осадке имеют низкую пластичность 4-6%, но при холодной осадке с боковым подпором могут быть подвергнуты интенсивной пластической деформации до 70-80% без разрушения [3]. В этой же работе было показано, что после осадки с боковым подпором деформированные образцы имели пластичность при последующей холодной осадке выше, чем в литом исходном состоянии. Мы предполагаем, что исходное состояние может сильно влиять на результаты последующих экспериментов по обычной холодной осадке и холодной осадке с боковым подпором.

Фактически литое состояние является исходным для наших экспериментов [3] и его следует аттестовать. Для того, чтобы выяснить особенности литой структуры и исследовать возможности уменьшения издержек на проведение первого передела мы предприняли настоящее исследование. Таким образом, целью нашего исследования явилось изучение микроструктуры и механических свойств магния в литом состоянии.

Выполнено исследование макроструктуры, микроструктуры и механических свойств технически чистого магния. Макроструктура отличается наличием столбчатой структуры с кристаллитами до 5 мм в диаметре и до 30 мм длиной, вытянутых в направлении теплоотвода. Методами электронной микроскопии выявлено наличие дислокационных петель, *a*-дислокаций и двойников разных ориентировок ещё до начала пластической деформации. Выявлено, что механические свойства литого магния сильно зависят от преимущественной кристаллографической ориентировки образца. Кривые упрочнения литого магния имеют экстремальный характер с максимумом при относительных обжатиях 10...15% и имеют форму, которая определяется суперпозицией характерных кривых, полученных при испытаниях монокристаллов на сжатие.

Исследование выполнялось при частичном финансировании Уральского отделения РАН (проекты № 12-У-2-1007 и № 12-2-023-РЦ), электронно-микроскопические исследования выполнены в ЦКП ИФМ УрО РАН.

1. Chapuis A., Driver J.H., Acta Mat., **59**, 1986-1994 (1994)
2. E.W. Kelly, W.F. Hosford, Jr. Trans. of the metallurgical society of AIME, **242**, 5-13 (1968)
3. Каменецкий Б.И., Логинов Ю.Н., Кругликов Н.А., Технология легких сплавов, **1**, 86-92 (2012)

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРИДА ТИТАНА И РАСТРЕСКИВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ ОБРАЗЦОВ ПРИ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОМ НАСЫЩЕНИИ ВОДОРОДОМ И ПРИ НАСЫЩЕНИИ ИЗ ГАЗОВОЙ АТМОСФЕРЫ

Кудияров В.Н.*, Пушилина Н.С.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

*E-mail: victor31479@mail.ru

Водород, накапливаясь в твердых телах, изменяет упругие, прочностные и прочие эксплуатационные и физико-химические свойства металлов и сплавов. Локализуясь и образуя гидридные фазы в местах с повышенной дефектностью, водород вызывает охрупчивание материала [1]. Для создания методов по защите конструкционных материалов от проникновения водорода необходимо изучать особенности образования гидридов при различных методах наводороживания образцов. В работе представлены результаты рентгенографических и микроскопических исследований образцов титанового сплава ВТ1-0 после насыщения водородом из газовой атмосферы и электролитическим методом.

Электролитическое насыщение осуществлялось в одномолярном растворе серной кислоты в течение 360 минут при силе тока 0.73 А при комнатной температуре. Насыщение из газовой атмосферы по методу Сивертса осуществлялось на автоматизированном комплексе «Gas Reaction Controller» фирмы «Advanced Materials Corporation» [2] при температуре 600°C в течение 60 минут при постоянном давлении в камере 0.66 атм. Результатом насыщения является формирование гидридов титана на поверхности образцов (Таблица 1).

Таблица 1. Результаты рентгенографических исследований

Образец	Обнаруженные фазы	Содерж. фаз, об. %	Пар-ры решетки
Исходный	Ti_hexagonal	99.9 ± 0.1	a = 2.9402; c = 4.6680
Электролитическое насыщение	Ti_hexagonal	40.1 ± 0.2	a = 2.9170; c = 4.6330
	TiH ₂ _cubic	59.9 ± 0.2	a = 4.3544
Насыщение из газовой атмосферы	Ti_hexagonal	59.74 ± 0.5	a = 2.9360; c = 4.6663
	TiH ₂ _cubic	40.26 ± 0.3	a = 4.3846

Так как выделение гидрида вызывает увеличение объема до 15–21 %, то большие сжимающие напряжения, индуцированные в матрице, обеспечивают основной вклад в водородную хрупкость [3]. Таким образом, образование на поверхности образцов гидридов приводит к растрескиванию поверхности (Рисунок 1).

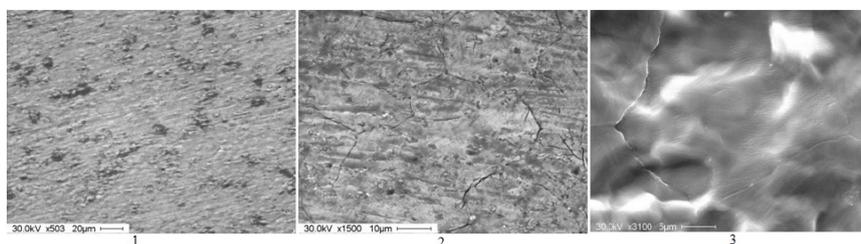


Рис. 1. Результаты микроскопических исследований образцов: 1 – исходный образец; 2 – электролитическое насыщение; 3 – насыщение из газовой атмосферы.

1. Чернов И.П., Черданцев Ю.П., Тюрин Ю.И., Методы исследования систем металл-водород, Энергоатомиздат (2004)
2. www.advanced-material.com
3. Yan L., Ramamurthy S., Noel J.J., Shoesmith D.W., Hydrogen absorption into alpha titanium in acidic solutions, *Electrochimica Acta*, p. 52 (2006)

ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ УМЗ ЧИСТОГО НИКЕЛЯ, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ДКУП

Кузнецов Д.Д.^{1*}, Столбовский А.В.¹, Попов В.В.¹, Шорохов Е.В.²

¹)Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²)Российский федеральный ядерный центр – ВНИИТФ, г. Снежинск, Россия

*E-mail: dfertyn@yandex.ru

Важнейшей проблемой материалов с субмикроструктурной структурой является их низкая термическая стабильность. Представлялось интересным провести структурные исследования чистого никеля, в котором ультрамелкозернистая (УМЗ) структура, сформирована новым методом интенсивной пластической деформации (ИПД) – динамическим канально-угловым прессованием (ДКУП). Данная методика ИПД разработана в Российском федеральном ядерном центре – ВНИИ технической физики (г. Снежинск) [1] как альтернативная равно-канальному угловому прессованию (РКУП), основным отличием которой является то, что вместо прессового оборудования используется энергия пороховых газов, что позволяет реализовывать очень большие скорости деформации.

ДКУП проводилось на образцах поликристаллического никеля с чистотой 99.9 % (исходный размер зерна 150 – 350 мкм) на 1, 2 и 3 прохода.

Полученные образцы исследовались при помощи просвечивающей и сканирующей (анализ дифракции обратно рассеянных электронов – так называемый EBSD метод) электронной микроскопии, металлографии, а также дюротрии.

Для исследования термической стабильности образцы подвергались отжигам в течение одного часа на температуры от 200 до 500°C с шагом в 100°C.

В результате ДКУП на 1 и 2 прохода в никеле была получена ячеистая структура с высокой плотностью дислокаций, после трех проходов структура становится в целом зеренно-субзеренной, причем в некоторых местах видны сформировавшиеся кристаллиты (200 – 500 нм) с тонкими границами.

Дюротрические исследования показали, что все три группы образцов сохраняют высокие значения микротвердости вплоть до 400°C, однако после отжига при 500°C наблюдается резкое падение значений микротвердости.

Микроскопические исследования показали, что для всех трех образцов с повышением температуры уменьшается доля малоугловых границ и увеличивается средний размер зерна. После отжига при 500°C во всех трех образцах наблюдалась практически полностью рекристаллизованная структура с высокоугловыми границами.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 12-П-2-1016), частичной поддержке РФФИ (проект 12-03-91331-ННИО).

1. Шорохов Е.В., Жгилев И.Н., Валиев Р.З., Способ динамической обработки материалов: Патент № 2283717 РФ, Бюллетень изобретений №26 (2006)

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА $Ti - Al_3Ti$ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ НАГРУЖЕНИЯ И СООТНОШЕНИЯХ МЕТАЛЛ/ИНТЕРМЕТАЛЛИД

Лавриков Р.Д.^{1*}, Бородин Е.М.², Пацелов А.М.¹, Гладковский С.В.²

¹)Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²)Институт машиноведения УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: lavrikov.r@mail.ru

Слоистые композиты типа «металл–интерметаллид» относятся к новому классу многофункциональных материалов, представляющему одно из перспективных направлений в современном материаловедении [1, 2]. Используя в качестве исходных материалов фольги (или листы) титана и алюминия, удастся синтезировать слоистые композиты $Ti - Al_3Ti$ с помощью реакционного спекания под давлением в обычной воздушной атмосфере. Механические свойства получаемых таким образом композитов можно регулировать, подбирая соответствующее соотношение толщин исходных фольг.

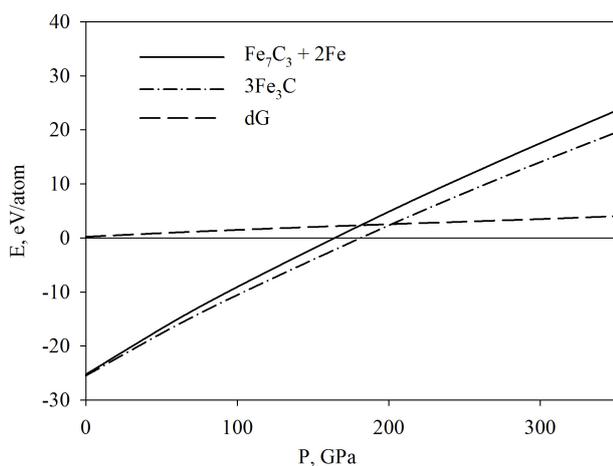
Методами статических и динамических испытаний проведена оценка механических свойств композитов с различным содержанием металлической и интерметаллидной составляющих. Для композитов с 15 % триалюминид титана, в которых металлическая часть представлена и титаном, и не прореагировавшим в процессе реакционного спекания алюминием, свойства оказались различными. Так, например, для образцов с V-образным надрезом, пересекающим последовательно чередующиеся металлические и интерметаллидные слои, работа, затрачиваемая на распространение трещины, в 3 – 4 раза превышает аналогичную величину для образцов, в которых надрез пересекает вышеупомянутые слои одновременно. При статическом сжатии для направлений приложения нагрузки вдоль и поперек слоев предел пропорциональности различается в полтора раза, а деформация при пиковой нагрузке – почти на порядок. Для сочетания объемных долей металлической (15 %) и интерметаллидной (85 %) составляющих первые экспериментальные наблюдения показали отсутствие столь ярко выраженной анизотропии, как для приведенного выше случая. Например, предел прочности на сжатие при продольном относительно слоев направлении нагрузки составил в среднем 464 МПа, а при поперечном направлении – 451 МПа. Для динамического нагружения образцов также нет ярко выраженного характера анизотропии свойств. Так, например, ударная вязкость для продольного направления приложения нагрузки составила 120 кДж/м², тогда как для поперечного направления эта величина в среднем 110 кДж/м².

Кроме измерения механических свойств, проводились также исследования изломов поверхностей разрушения, которые показали, что титановые слои разрушаются вязко с характерным чашевидным изломом, а интерметаллидные слои разрушаются хрупко.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта президиума УрО РАН № 11-2-13-РЦ и проекта РФФИ-урал № 10-02-96041. Измерения механической прочности слоистых композитов при статическом нагружении выполнены в Центре коллективного пользования «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» ИФМ УрО РАН. Измерения ударной вязкости и фрактографические исследования проведены в центре коллективного пользования «Пластометрия» Института машиноведения УрО РАН.

1. Vecchio K.S., Synthetic multi-functional materials by design using metallic-intermetallic laminate (MIL) composites, Nano and microstructural design of advanced materials, Elsevier Ltd., USA, 243 (2003)
2. Пацелов А.М., Рыбин В.В. и др., Деформация и разрушение материалов, **6**, 27 (2010)

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМЫ Fe – C

Лопатин М.Л.^{1*}, Попов З.И.^{1,2}¹Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева,
г. Красноярск, Россия²Институт физики СО РАН им. Л.В. Киренского, г. Красноярск, Россия*E-mail: lopatin-ml@mail.ruРис. 1. Энергия реакции $\text{Fe}_7\text{C}_3 + 2\text{Fe} \rightarrow 3\text{Fe}_3\text{C}$ при $T = 0 \text{ К}$.

Внутреннее твердое и внешнее жидкое ядра Земли состоят из сплава на основе железа, но, согласно сейсмическим данным, плотность ядра на несколько процентов ниже, чем плотность чистого железа или железо-никелевого сплава при соответствующих температурах и давлениях. Из закона Бёрча [1] следует, что средняя атомная масса ядра приблизительно равна 49, в то время как для чистого железа она равна 55.85. Возможно, такое различие связано с присутствием более легких элементов [2]. Одним из легких элементов может выступать углерод. Квантово-химическое моделирование различных карбидов железа поможет выяснить, какой из них будет находиться в ядре Земли.

В работе проводится сравнение фазы Fe_3C со смесью $\text{Fe}_7\text{C}_3 + \text{Fe}$. Все расчеты выполнены в программе VASP 5.2 в рамках теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении. Рассчитанные энергии E_0 на атом, объем V_0 на моль, параметры уравнения состояния Бёрча-Мурнагана K_0 и K^1 при $T = 0 \text{ К}$ представлены в таблице.

Соединение	Простр. группа	E_0 , эВ/атом	V_0 , cm^3/mol	K_0 , GPa	K^1
Fe_7C_3	$P6_3mc$	-8.51	52.19	346	3.57
Fe_3C	$Pnma$	-8.50	21.62	320	3.71
Fe	$P6_3mnc$	-8.37	6.14	324	3.63

На рисунке 1 показана полная энергия $3\text{Fe}_3\text{C}$ и смеси $\text{Fe}_7\text{C}_3 + 2\text{Fe}$ при давлении от 0 до 350 ГПа, а также приведена разница этих энергий dG . Показано, что фаза Fe_3C энергетически более выгодна, чем смесь Fe_7C_3 и Fe на всем диапазоне давления. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с [3].

1. Birch F., J. Geophys. Res., **57**, 227 (1952)
2. Бажанова З.Г. и др., УФН, **182**, 5, 521 (2012)
3. Mookherjee M. et al., J. Geophys. Res., **116**, B04201 (2011)

МЕХАНИЧЕСКОЕ ЛЕГИРОВАНИЕ СТАЛЕЙ АЗОТОМ МЕТОДОМ ПОМОЛА В ШАРОВОЙ МЕЛЬНИЦЕ

Ляшков К.А.*, Козлов К.А., Шабашов В.А., Литвинов А.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Методами мёссбауэровской спектроскопии и рентгеноструктурного анализа (железа и сплавов Fe-(Cr, V, Al)) показано твердофазное механическое растворение дисперсных нитридов CrN в порошковых смесях [1].

В процессе деформационно-индуцированных циклических фазовых превращений типа «растворение-выделение» нитридов получены пересыщенные азотом ОЦК кристаллические твердые растворы и вторичные чрезвычайно дисперсные нитриды – сформированы высокоазотистые нанокompозиты.

Исследовано влияние легирования матрицы железа нитридообразующими ванадием и алюминием (до 5 ат. %) на процессы твердофазного механосплавления. Установлено, что как ванадий, так и алюминий ускоряют процессы неравновесного растворения нитрида хрома в ОЦК матрице железа. В сплаве с ванадием уже в результате растворения первичных нитридов во время помола происходит выход ванадия из матрицы и формирование вторичных нитридов ванадия.

Последующий отжиг механически сплавленных образцов способствует полному выходу алюминия и ванадия из матрицы с сохранением хрома в позициях замещения ОЦК твердого раствора железа и выделением чрезвычайно дисперсных вторичных нитридов хрома, алюминия и ванадия.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ (№ 10-03-00113, 11-02-224 и 12-03-00040), междисциплинарного проекта 12-М-23-2031, Президиума РАН (№ 12-П-2-1043) и Президиума УрО РАН (№ 12-У-2-1020).

1. Шабашов В.А., Борисов С.В., Литвинов А.В., Сагарадзе В.В., Заматовский А.Е., Ляшков К.А., Вильда-нова Н.Ф., ФММ, **113**, 517 (2012)

РЕЛАКСАЦИОННОЕ И РЕЗОНАНСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ УЛЬТРАЗВУКА ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИМИ ЦЕНТРАМИ В КРИСТАЛЛЕ GaAs : Cu

Аверкиев Н.С.¹, Гудков В.В.², Берсукер И.Б.³, Барышников К.А.¹, Жевстовских И.В.^{2,4},
Маякин В.Ю.^{2*}, Монахов А.М.¹, Сарычев М.Н.², Седов В.Е.¹

¹)Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, Россия

²)Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

³)Institute for Theoretical Chemistry, The University of Texas at Austin, USA

⁴)Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: vlmayakin@yandex.ru

Теоретически и экспериментально исследовано взаимодействие ультразвука с комплексами CuGa_4As в кристалле GaAs. GaAs является полупроводниковым кристаллом, обладающим кристаллической структурой цинковой обманки (сфалерита), с шириной запрещенной зоны ≈ 1.5 эВ. Температурные зависимости поглощения $\alpha(T)$ были измерены для всех нормальных ультразвуковых мод, распространяющихся в направлении $\langle 110 \rangle$, как в легированных медью, так и в номинально чистых кристаллах арсенида галлия в интервале $4.2 \div 100$ К.

Температурные зависимости медленной и быстрой поперечных мод в GaAs:Cu показаны на рисунке 1 кривыми 1 и 3 соответственно. Кривая 2 представляет медленную поперечную моду в номинально чистом GaAs. Аномалия поглощения в виде пика при $T \approx 11$ К наблюдается лишь в примесном образце для медленной моды, упругие смещения которой соответствуют симметрии тетрагональной моды эффекта Яна-Теллера, чья скорость определяется упругим модулем $C_s = (C_{11} - C_{12})/2$.

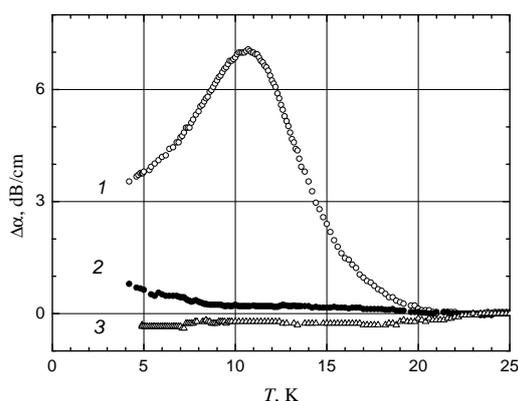


Рис. 1. Температурные зависимости изменения коэффициента поглощения поперечных ультразвуковых волн, распространяющихся в направлении $\langle 110 \rangle$.

Характер температурной зависимости поглощения этой волны свидетельствует о том, что имеет место поглощение двух типов: релаксационное и резонансное. Были получены оценки вкладов каждого из двух типов в общее поглощение ультразвука, а также была реконструирована температурная зависимость времени релаксации [1]. Она свидетельствует о том, что при температурах ниже 10 К основным механизмом релаксации является туннелирование через потенциальный барьер между минимумами адиабатического потенциала. На основе экспериментальных данных получена оценка величины туннельного расщепления [2], которая находится в хорошем согласии с теоретической.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (№ 12-02-00467-а).

1. Gudkov V., The Jahn-Teller effect: fundamentals and implications for physics and chemistry (ed. by Koppel H., Yarkony D.R., and Barentzen H.), Berlin: Springer (2009)
2. Bersuker I.B., The Jahn-Teller Effect, Cambridge University Press (2006)

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ $\text{Cr}_x\text{Ti}_y\text{Se}_2$ Меренцов А.И.^{1,2*}, Селезнёва Н.В.¹, Титов А.Н.^{1,2}, Воронин В.И.², Бергер И.Ф.²¹Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: Alex_fisik@mail.ru

Слоистые диселениды с общей формулой $\text{Cr}_x\text{Ti}_y\text{Se}_2$ интересны в связи с высокой спиновой поляризацией в них и с возможностью применения этих материалов в спиновой электронике. Степень поляризации может зависеть от позиции хрома в кристаллической решётке. Для определения зависимости параметров элементарной ячейки от положения хрома в кристаллической решётке, а также для дальнейшего исследования влияния положения хрома в решётке на магнитные свойства соединений $\text{Cr}_x\text{Ti}_y\text{Se}_2$, в дополнение к уже изученным интеркалатным соединениям Cr_xTiSe_2 [1 – 3] и твёрдым растворам замещения $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$ [4] синтезированы интеркалированные титаном диселениды хрома Ti_xCrSe_2 . Поскольку факторы рассеяния для рентгена у титана и хрома практически одинаковы, на основании рентгеновских данных трудно однозначно определить, какие позиции занимают титан и хром. В качестве дополнительной методики, позволяющей определить точные кристаллографические координаты каждого металла, была выбрана нейтронография. Факторы атомного рассеяния для нейтронов у титана и хрома разные, поэтому дифрактограммы будут различаться в зависимости от кристаллографического положения каждого из металлов. Для сравнения использовались три соединения: $\text{Cr}_{0.25}\text{TiSe}_2$, $\text{Cr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{Se}_2$ и $\text{Ti}_{0.3}\text{CrSe}_2$. Параметры элементарной ячейки в пересчёте на тригональную элементарную ячейку приведены в таблице. Данные для TiSe_2 взяты из работы [5].

Соединение	$a_0, \text{Å}$	$c_0, \text{Å}$	$\beta, ^\circ$	группа
TiSe_2	3.540	6.008	90	$P - 3m1$
$\text{Cr}_{0.3}\text{Ti}_{0.7}\text{Se}_2$	3.550	5.959	90	$P - 3m1$
$\text{Cr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{Se}_2$	3.552	5.934	90	$P - 3m1$
$\text{Cr}_{0.25}\text{TiSe}_2$	3.575	5.957	90.45	$F 2/m$
$\text{Ti}_{0.3}\text{CrSe}_2$	3.569	5.886	90.66	$F 2/m$

При замещении титана на хром в области концентрация хрома $x < 0.5$ не образуется упорядоченного твёрдого раствора, а титан и хром занимают позиции исключительно внутри слоёв селен-металл-селен. При интеркаляции наблюдается упорядочение как в направлении оси c , так и в направлении осей a и b . Сингония соединения при этом понижается до моноклинной с небольшим углом моноклинности.

Работа выполнена при финансовой поддержке молодых учёных Уральского федерального университета в рамках реализации программы развития УрФУ в 2012 году.

- Ohtsuka N., Kosuge K., Nakayama N., Ueda Y., Kachi S., J. Solid State Chem., **45**, 411 (1982)
- Pleschov V.G., Baranov N.V., Titov A.N., Inoue K., Bartashevich K., Goto T., J. Alloys and Compounds, **320**, 13 (2001)
- Куранов А.В., Плещев В.Г., Титов А.Н., Баранов Н.В., Красавин Л.С., ФТТ, **42**, 2029 (2000)
- Merentsov A.I., Yarmoshenko Yu.M., Skorikov A.N., Titov A.N., Buling A., Räkens M., Neumann M., Galieva E.G., Slepudin P.A., J. electr. spectr. and rel. phen., **182**, 70 (2006)
- Hibma T., Intercalation Chemistry, Acad. Press, 285 (1982)

О ДИНАМИКЕ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ РОТАЦИИ ПРИ РАВНОКАНАЛЬНОМ МНОГОУГЛОВЫМ ПРЕССОВАНИИ ВЯЗКИХ МАТЕРИАЛОВ ЧЕРЕЗ ШТАМП С ПОДВИЖНОЙ СТЕНКОЙ

Периг А.В.^{1*}, Голоденко Н.Н.²

¹)Донбасская государственная машиностроительная академия, г. Краматорск, Украина

²)Донбасская национальная академия строительства и архитектуры, г. Макеевка, Украина

*E-mail: olexander.perig@gmail.com

Процессы равноканального многоугольного прессования (РКМУП) находят применение во многих областях физики твердого тела и материаловедения [1, 2]. Динамика РКМУП зависит от реологии деформируемых материалов [1, 2], но недостаточно изучена для вязких течений в штампах с подвижными стенками, что и определяет актуальность исследования.

В первом приближении описание плоского вязкого ньютоновского течения при РКМУП возможно с применением уравнения переноса вихря (УПВ), безразмерная форма которого

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\mathbf{Re} \left(\frac{\partial(u\zeta)}{\partial x} + \frac{\partial(v\zeta)}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} \right), \quad (1)$$

где \mathbf{Re} – число Рейнольдса, а также безразмерные переменные: x и y – координаты; u и v – составляющие скорости w вязкого потока вдоль осей x и y ; t – время; $\zeta = \partial u / \partial y - \partial v / \partial x$ – вихрь.

Численное интегрирование (1) реализуется на основании конечноразностного подхода в соответствии с методом перемежающихся направлений, причем учет наличия подвижной входной стенки многоугольного штампа, движущейся параллельно направлению экструзии с безразмерной скоростью U_b , обеспечивается следующим граничным условием для безразмерной функции вихря ζ , записанной для узлов, относящихся к подвижной стенке:

$$\zeta_{i,j} = 2 \left(\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j} + U_b \eta \right) / \eta^2, \quad (2)$$

где ψ – безразмерная функция тока, η – безразмерный шаг координаты вдоль оси y , i и j – индексы номеров ячеек вдоль осей x и y . Численное интегрирование краевой задачи (1)–(2) реализовано на языке Object Pascal в соответствии с итерационным методом Гаусса–Зайделя.

Численные решения (1)–(2) показывают, что наличие подвижной входной стенки штампа, задающей переносное движение в системе, оказывает существенное влияние на характер вязкого течения материала в окрестности подвижной стенки. Установлено, что в случае, когда подвижная стенка движется навстречу вязкому потоку, т.е. $\mathbf{V}_{\text{wall}} \uparrow \downarrow \mathbf{U}_0$, где \mathbf{U}_0 – скорость прессования, то ближайшая к подвижной стенке линия тока «ускоряется» по сравнению со случаем неподвижной стенки $\mathbf{V}_{\text{wall}} = 0$. Гидродинамически наблюдаемый эффект объясняется тем, что расход вязкого потока остаётся неизменным, поскольку средняя скорость угловой экструзии \mathbf{U}_0 одна и та же. Прилегающий к подвижной стенке слой вязкого материала движется со скоростью $\mathbf{V}^* \approx \mathbf{V}_{\text{wall}}$ навстречу экструдированному потоку $\mathbf{V}^* \uparrow \downarrow \mathbf{U}_0$. Поэтому площадь живого сечения потока уменьшается, а значит, скорость потока возрастает. Ротационная трактовка состоит в том, что в прилегающем к движущейся стенке слое вязкого материала образуется отрицательный макроскопический вихрь, сужающий живое сечение вязкого потока. Также проанализирован случай, когда подвижная стенка штампа обгоняет поток, т.е. $\mathbf{V}_{\text{wall}} \uparrow \uparrow \mathbf{U}_0$. Установлено, что вблизи подвижной стенки штампа, обгоняющей вязкий поток со скоростью \mathbf{V}_{wall} , возникает положительный макроскопический вихрь, т.е. где-то ближе к оси входного канала штампа вязкий поток материала движется назад. Живое сечение прижато к противоположной неподвижной стенке штампа, в окрестности которой скорость вязкого потока при реализации РКМУП существенно возрастает.

1. Perig A.V., Laptev A.M., Golodenko N.N. et al., Mat. Sci. Eng. A-Struct., **527**, 3769 (2010)

2. Периг А.В., Голоденко Н.Н., Жбанков Я.Г. и др., Письма о материалах, **1**, 217 (2011)

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ YTiO_3 ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Петров В.П.*, Шмаков И.Г.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: lancervlad@gmail.com

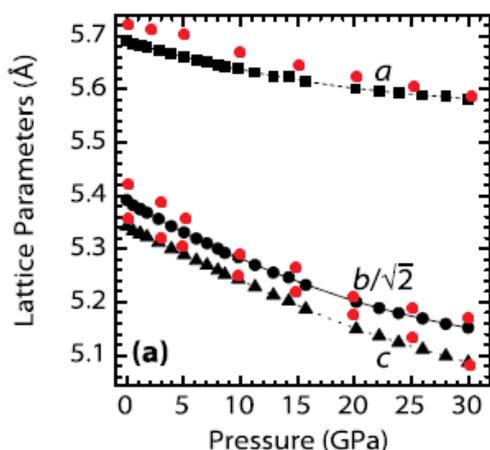


Рис. 1. Зависимость параметров решетки от давления (V3LYP – красные точки, эксперимент – черные точки).

использованием базисных орбиталей гауссова типа.

Одними из перспективных материалов являются оксиды переходных металлов, в том числе YTiO_3 , который относится к ряду $3d(t_{2g})^1$ перовскитов. Достоинствами оксидных систем является высокая чувствительность их свойств к внешним условиям, поэтому представляется актуальным исследовать влияние давления на кристаллическую структуру YTiO_3 . В последнее время появился ряд новых экспериментальных работ, в которых был исследован фононный спектр [1, 2], влияние давления на кристаллическую структуру и ширину запрещенной щели [3].

Кристаллическая структура YTiO_3 была рассчитана различными ab initio методами при прилагаемом гидростатическом давлении вплоть до 30 ГПа. Использовалась теория функционала плотности и метод неограниченного Хартри-Фока. Все расчеты проводились в программе для периодических структур CRYSTAL09 (<http://www.crystal.unito.it>) с использованием

Метод	a, Å	b, Å	c, Å
UHF	5.6831	7.8816	5.4137
V3LYP	5.7386	7.6765	5.3682
PBE0	5.7052	7.5891	5.3132
Exp. [4]	5.6901	7.6130	5.3381

Была получена зависимость параметров решетки YTiO_3 как функция прилагаемого гидростатического давления. Наилучшее согласие с экспериментом [3] дал расчет в рамках теории функционала плотности с используемым гибридным функционалом V3LYP. Также была показана необходимость учета межэлектронных корреляций для адекватного описания поведения структуры и основного состояния.

Была рассчитана электронная заселенность $3d$ состояний Ti вплоть до давления 70 ГПа (стоит заметить, что такое давление было достигнуто в расчетах впервые). Показана необходимость использования гибридных методов для описания динамики распределения заряда на оболочках. Сделан вывод о сильном искажении кислородных октаэдров относительно кубической симметрии путем анализа заселенности $3d$ -орбиталей Ti.

1. Kovaleva N.N. et al., Physical Review B, **79**, 4, 045114 (2009)
2. Sugai S. et al., Phys. Rev. B, **73**, 161101 (2006)
3. Loa I. et al., J. Phys.: Condens. Matter., **19**, 40 (2007)
4. Hester J.R. et al., Acta Crystallographica Section B, **53**(5), 739-744 (1997)

ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРЫ МЕДИ РАЗНОЙ СТЕПЕНИ ЧИСТОТЫ, ДЕФОРМИРОВАННОЙ ПРИ 80 К

Покрышкина Д.К.* , Чащухина Т.И., Воронова Л.М., Дегтярев М.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Деформация меди сдвигом под давлением при комнатной температуре сопровождается динамической рекристаллизацией (ДР) и неизбежной постдинамической рекристаллизацией (ПДР) после окончания деформации. В меди разной степени чистоты ПДР проявляется по-разному. В меди чистой 99.99 вес. % ПДР приводит к росту отдельных аномально крупных зерен, а в меди технической чистоты (99.90 вес. %) о протекании ПДР свидетельствует геометрически правильная форма столкнувшихся зерен и появление двойников отжига. Для подавления процесса ДР температуру деформации снизили до 80 К, поместив блок наковален с образцом в среду жидкого азота. Ожидали, что при низкотемпературной деформации будет создана большая плотность микрокристаллитов, а в результате статической низкотемпературной рекристаллизации при отогреве материала до комнатной температуры образуется однородная субмикрочернистая структура. Деформацию меди чистотой 99.90 и 99.99 вес. % проводили под давлением 5 ГПа с углом поворота наковальни от 15 градусов до 10 оборотов. Время от окончания деформирования до исследования твердости и структуры не превышало 24 ч. Повторно структуру исследовали после вылеживания при комнатной температуре от нескольких дней до 3 лет.

Понижение температуры деформации до 80 К привело к развитию в меди деформационного двойникования независимо от ее чистоты. Пакеты тонких (шириной 10 – 100 нм) двойников наблюдали после деформации до 2 – 5 оборотов наковальни. Длина их определяется размером элементов разориентированной структуры. С увеличением степени деформации двойники фрагментировались. Следует отметить, что двойники деформации никогда не наблюдались внутри микрокристаллитов, как и микрокристаллиты в областях, занятых двойниками деформации. Микрокристаллиты формировались в структуре ячеистого типа, которая занимала значительный объем деформированного материала. Ячеистая структура сохранилась даже после 10 оборотов наковальни, то есть однородная субмикрочернистая структура не образовалась.

Полученная в результате низкотемпературной деформации структура оказалась крайне нестабильной. Отогрев до комнатной температуры привел к началу статической рекристаллизации. В чистой меди отдельные зародыши рекристаллизации сформировались при отогреве после деформации осадкой, а в меди технической чистоты – после деформации на 1 оборот наковальни. С ростом степени деформации увеличивался размер наиболее крупных зерен и доля рекристаллизованной структуры. Вылеживание сопровождалось дальнейшим развитием рекристаллизации. В чистой меди, деформированной на 10 оборотов наковальни, рекристаллизация завершилась за 1 неделю. В меди технической чистоты в течение 1.5 лет не наблюдали роста центров рекристаллизации, сформировавшихся после деформации на 1 оборот наковальни. А после деформации на 2 и более оборотов за это время выросли отдельные крупные зерна размером до 80 мкм, но сохранилась значительная доля нерекристаллизованной структуры.

Таким образом, деформационное двойникование не позволяет получить однородную субмикрочернистую структуру при деформации и субмикрочернистую структуру при последующей низкотемпературной рекристаллизации.

Работа выполнена по теме «Структура» № г.р. 01201064335 и при частичной финансовой поддержке проекта РФФИ №11-03-00401. Электронно-микроскопическое исследование выполнено в ЦКПЭМ ИФМ УрО РАН.

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ, ЛЕГИРОВАННЫХ НИКЕЛЕМ

Родыгина А.В., Королёв М.Н., Печина Е.А., Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И.

Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия

E-mail: las@pti.udm.ru

С развитием новой техники и повышением её качества предъявляются особые требования к материалам, в частности алюминиевым сплавам, способным выдерживать длительные высокотемпературные воздействия. Вызывают особый интерес сплавы на основе алюминия, легированные переходными металлами [1]. Перспективным методом получения материалов с повышенными прочностными характеристиками является интенсивная пластическая деформация [2].

В работе изучено влияние интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК) на структуру и свойства сплавов системы Al–Ni с содержанием никеля 1.5; 2.7 и 4.0 ат. % (соответственно доэвтектического, эвтектического и заэвтектического составов). Образцы деформировали в наковальнях Бриджмена \varnothing 8 мм при осевой нагрузке 3 ГПа на 3/4, 3, 4, 8 и 16 оборотов. В ходе деформирования определяли изменение момента силы, приложенного к образцу, по мере изменения угла закручивания. Обнаружено, что характер изменения момента силы при кручении зависит как от состава сплава, так и его предварительной термической обработки. Выявлена взаимосвязь между исходным состоянием сплавов и особенностями диаграммы момент силы – угол закручивания.

Микротвёрдость полученных образцов измеряли на приборе ПМТ-3 под нагрузкой 20 г. Установлено, что в результате ИПДК после 8 оборотов микротвёрдость материала возрастает до значений 1.4 – 1.6 ГПа для до- и заэвтектического сплавов и до 2.1 ГПа – для эвтектического.

Методами рентгеновской дифракции произведен фазовый анализ, рассчитаны параметры решетки Al и размеры микрокристаллитов Al и фазы Al₃Ni. Показано, что увеличение степени деформации приводит к уменьшению размеров микрокристаллитов с (89.7 ± 1.7) нм до (59.2 ± 1.2) нм для сплава Al с 1.5 ат. % Ni. Расчеты показывают также рост микронапряжений при увеличении степени деформации.

С целью изучения способности материала сохранять приобретенные при ИПДК повышенные механические свойства был произведен отжиг сплавов в интервале температур 100 – 400°C. Заметное – до $1.1 \div 1.2$ ГПа – снижение твердости наблюдается уже после отжига при 100°C. Последующее повышение температуры отжига приводит к дальнейшему снижению микротвёрдости до величин $\sim 0.35 - 0.5$ ГПа. Показано, что такое поведение микротвёрдости при повышении температуры обусловлено рекристаллизационными процессами, а также обеднением α -твёрдого раствора по никелю.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН, проект № 12-П-2-1044, гранта РФФИ № 12-03-31400 мол_а.

1. Belov N.A., Journal of Advanced Materials, **4**, 321 (1994)
2. Бродова И.Г., Байтыков Д.В., Ширинкина И.Г., Столяров В.В., Материаловедение, **95**, 48 (2005)

ЭМИССИОННАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН МЕДИ, ПРОДЕФОРМИРОВАННОЙ КВД ПРИ КРИОГЕННОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

Столбовский А.В.* , Попов В.В., Попова Е.Н., Пилюгин В.П.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

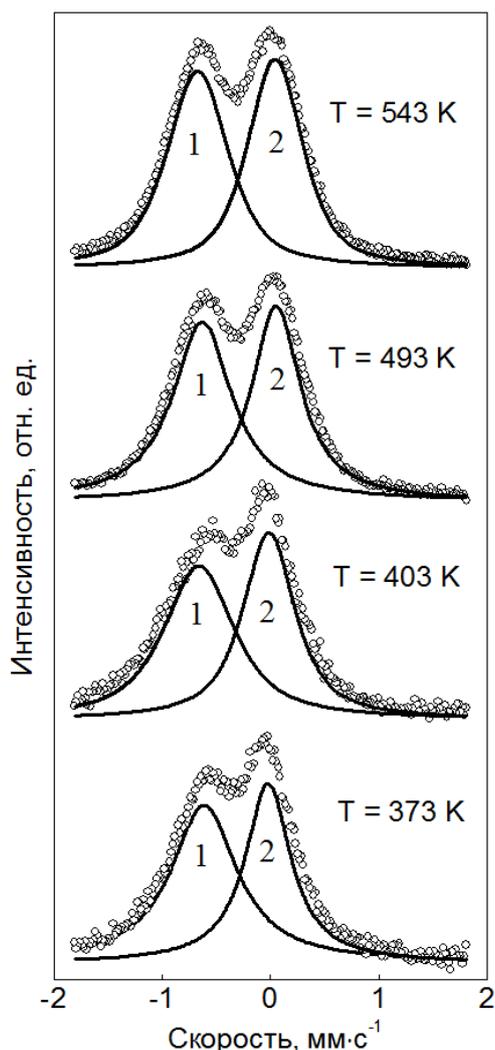


Рис. 1. Эмиссионные Мессбауэровские спектры ^{57}Co (^{57}Fe) в меди технической чистоты, полученной КВД в жидком азоте, после различных температур отжига.

Отсутствует и отток атомов ^{57}Co из границ в объем, о чем свидетельствует отсутствие изменения относительной интенсивности спектральных линий.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 12-П-2-1016), частичной поддержке РФФИ (проект 12-03-31683 мол_а) и РФФИ (проект 10-03-00530).

Выполнено исследование границ зерен в образце меди технической чистоты, продеформированной КВД на 10 оборотов при температуре жидкого азота, методом эмиссионной Мессбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Co (^{57}Fe). Эмиссионная Мессбауэровская спектроскопия является единственным методом, который позволяет непосредственно выявить наличие различных путей массопереноса и выявить различия в их локальных свойствах.

Проведенные исследования показали, что в данном случае, как и во всех ранее исследованных поликристаллических металлах, в зернограницных эмиссионных Мессбауэровских спектрах при всех исследованных температурах присутствуют две линии (Рис. 1), одна из которых (компонента 1) формируется Мессбауэровскими атомами, локализованными в границах зерен, а вторая (компонента 2) атомами, расположенными в приграницных областях кристаллитов.

На основании значения изомерного сдвига компоненты 1 найдено, что электронная плотность на Мессбауэровских атомах, расположенных в границах зерен, ниже, чем в объеме кристаллитов. Это позволяет утверждать, что зернограницная диффузия ^{57}Co в меди, полученной ИПД, как и в обычной поликристаллической меди, реализуется по вакансионному механизму.

Обнаружено, что при нагреве вплоть до 543 К параметры Мессбауэровских спектров практически не изменяются. Это свидетельствует о том, что в образце, полученном КВД в жидком азоте и подвергнутом последующей выдержке при комнатной температуре, сформировалась стабильная структура. Границы зерен практически не отличаются от границ рекристал-

ПРИМЕНЕНИЕ ДИФРАКЦИОННЫХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА К ИЗУЧЕНИЮ
СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ПОВЕРХНОСТЕЙ
АЗОТИРОВАННЫХ АУСТЕНИТНЫХ СТАЛЕЙ

Сумин Г.В.*, Чукин А.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: goethesum@gmail.com

Хорошо известно [1], что азотирование аустенитных сталей низкоэнергетическими плазменными пучками способно значительно изменить свойства поверхностей на глубине до десятков микрон. Азотирование существенно увеличивает износостойкость материала, увеличивает его твердость, повышает устойчивость к коррозии. Ясно, что причиной изменения физических свойств сталей является диффузия атомов азота в поверхностных слоях и внедрение их в кристаллическую решетку аустенита, что приводит к появлению в поверхностных слоях так называемой S-фазы, представляющей собой перенасыщенный твердый раствор с разупорядоченной гранецентрированной кубической структурой [2], природа которой до конца не ясна.

Основным методом контроля процесса азотирования аустенита является рентгеноструктурный анализ. В данной работе методами рентгеноструктурного анализа исследуются изменения поверхностных слоев образцов аустенитной стали, подвергнутых плазменному азотированию при температуре от 400, 450 и 500 градусов.

Исследование образцов проводилось в несколько этапов. На первом этапе проводился фазовый анализ дифрактограмм, снятых с геометрией по Бреггу-Брентано. Затем поверхностные особенности образцов изучались при помощи наклонной съемки и съемки скользящим пучком.

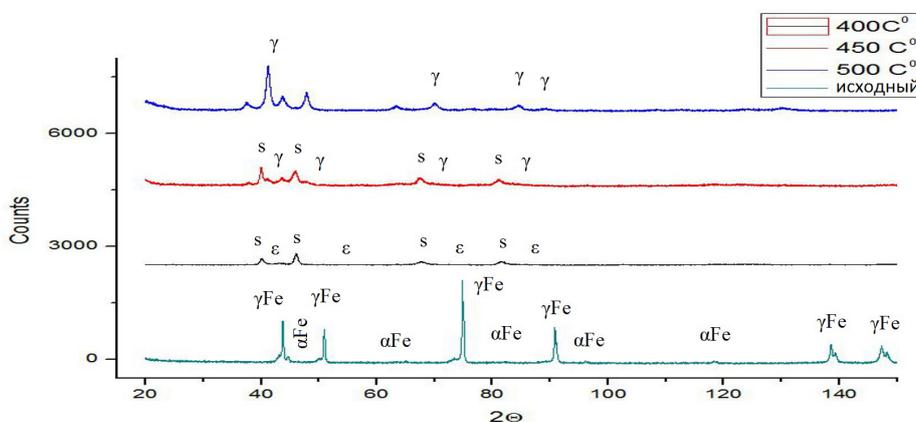


Рис. 1. Дифрактограммы различных образцов.

На прилагаемом рисунке представлены дифрактограммы образцов. В исходном образце основной является ГЦК фаза железа, обозначенная на рисунке как γ -Fe, присутствуют также линии ОЦК фазы α -Fe. В образце после азотирования при 400°C S-фаза является основной, дополнительной к ней является мелкодисперсная нитридная фаза ϵ -Fe₂₋₃N. С увеличением температуры плазменного азотирования содержание S-фазы в поверхностном слое уменьшается. При 450°C к S-фазе добавляется нитридная фаза γ -Fe₄N, обозначенная как γ . При 500°C основной фазой становится Fe₄N, при этом дополнительно появляется фаза CrN.

1. Sun Y., Li X.Y., Bell T., J. of Mat. Science, **34**, 4793 (1999)

2. Ichii K., Fujimura K., Takase T., Technol. Rep. Kansai Uni., **27**, 135 (1986)

Влияние низкотемпературной ИПД на механизмы образования Cu – Zn твердых растворов

Толмачев Т.П.^{1*}, Пилюгин В.П.¹, Пацелов А.М.¹, Панфилов П.Е.²

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: timpt@mail.ru

Исследованы процессы образования твердых растворов при холодной ($T = 290$ К) и низкотемпературной ($T = 80$ К) деформациях в системе с отрицательной (Cu – Zn) энтальпией смешения. Механосинтез проводился интенсивной пластической деформацией (ИПД) под квазигидростатическим давлением 6 ГПа в камере Бриджмена с вращаемыми наковальнями. Деформация при обеих температурах проводилась на равные степени – от относительно малых при начальных углах поворота (от 15 градусов) до мегапластических (до 15 полных оборотов и более) при многоступенчатых обработках. Максимальная мегадеформация составляла до 9 единиц истинной деформации. Исходное состояние материала – гетерогенная смесь элементных порошков концентраций $\text{Cu}_{100-x} - \text{Zn}_x$ ($x = 5; 10; 15; \dots; 95$). Влияние температуры подробно исследовано на смесях состава $\text{Cu}_{80} - \text{Zn}_{20}$. Структура и свойства образцов исследовались с применением комплекса методов: металлография, электронная просвечивающая и сканирующая микроскопия, рентгеновская дифрактометрия, синхротронное излучение, измерение механических свойств методами микротвёрдометрии и *in situ* измерение сопротивления сдвиговой деформации скручивания образцов.

Установлено влияние температуры на структурные изменения порошков меди и цинка и кинетику образования твердых растворов при деформации. По рентгеноструктурным данным рассчитана концентрационная зависимость параметров решётки. Измерены механические свойства образцов от концентрации сплавов и степени деформации. Проведено фрактографическое исследование образцов при холодном и низкотемпературном разрушении.

Особый интерес представляют результаты по влиянию снижения температуры на кинетику образования твёрдых растворов. Установлено, что наиболее интенсивная стадия формирования твёрдого раствора наступает при фрагментации структуры как у компонент, так и у твёрдого раствора до субмикро- и наномасштабного уровней. При этом металл находится в состоянии однородной высоко разориентированной нанокристаллической структуры. Формирование наноструктур в обоих металлах происходит через формирование и эволюцию дислокационных ячеистых структур. Обнаружено, что снижение температуры существенно замедляет формирование и совершенствование ячеистых структур. Рассмотрены механизмы влияния температуры на образование и концентрацию точечных дефектов, в частности вакансий, играющих основную роль при переносе ионов компонент и образовании твёрдых растворов в процессе деформации. Снижение температуры деформации до температуры кипения азота приводит к замедлению процессов двойного поперечного скольжения и протаскиванию порогов дислокаций при их пересечении, что и затрудняет образование вакансий.

Работа выполнена в рамках темы «Импульс» и при частичной поддержке проекта Президиума РАН № 12-П-2-105. Электронно-микроскопические измерения проведены в ЦКПЭМ ИФМ УрО РАН.

ИССЛЕДОВАНИЕ КУМУЛЯЦИИ ЭНЕРГИИ ПРИ ВЗРЫВНОМ НАГРУЖЕНИИ
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ШАРОВ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ РАЗЛИЧНОЙ СИММЕТРИИ

Литвинов Б.В.², Зельдович В.И.¹, Хейфец А.Э.^{1*}, Фролова Н.Ю.¹, Хомская И.В.¹

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Российский федеральный ядерный центр – ВНИИТФ, г. Снежинск, Россия

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

В работе представлен краткий обзор результатов исследований по квазисферическому и низкосимметричному нагружению металлических материалов сходящимися ударными волнами, проводимых в ИФМ УрО РАН совместно с РФЯЦ-ВНИИТФ под руководством академика Б.В. Литвинова на протяжении двух последних десятилетий. Исследуемые виды нагружения осуществляются следующим образом. Шаровые образцы диаметром от 40 до 80 мм помещаются внутрь сферического заряда взрывчатого вещества (ВВ), с поверхности которого одновременно в нескольких точках производится инициирование взрыва. При использовании ВВ большой мощности образец вместе с зарядом помещается в массивную металлическую оболочку, скорость разлёта которой лимитирует скорость разгрузки, предохраняя образец от полного разрушения. Симметрия нагружения задаётся числом точек инициирования, в которых осуществляется подрыв заряда, окружающего образец, а также несинхронностью срабатывания детонаторов, вносящей в геометрию нагружения дополнительные искажения.

В ходе исследований было показано, что использование таких схем нагружения обладает некоторыми преимуществами по сравнению со сферическим воздействием. Во-первых, в ряде случаев удаётся получить в образце такие же высокие давления, как и при сферическом нагружении (300 МПа и более в объёме образца порядка сотен мм³), при существенном упрощении технологии проведения эксперимента. Во-вторых, упрощённая «оснастка» эксперимента предполагает уменьшение отрицательного влияния технологических зазоров, неизбежно присутствующих в устройстве инициирования сферической ударной волны, содержащем сотни и более детонаторов. Отсутствие зазоров означает возможность более медленной разгрузки и более длительного «удерживания» образца в нагруженном состоянии (десятки микросекунд). Наконец, в-третьих, низкосимметричные схемы нагружения позволяют изучать процессы взаимодействия ударных волн, распространяющихся от различных точек инициирования, и эволюцию конфигурации ударно-волнового фронта, приводящую к кумуляции энергии, по остаточным изменениям микроструктуры нагруженных образцов. Указанные процессы происходят в миллионные доли секунды, и их прямое наблюдение представляет собой сложную и трудоёмкую задачу. Однако информация об этих быстропротекающих процессах может быть получена сравнительно простыми методами исследования микроструктуры нагруженных образцов.

В результате проведённых исследований изучено влияние мощности ВВ, свойств нагружаемого материала, количества точек инициирования и величины несинхронности на возможность протекания кумуляции энергии. Изучены регулярный и маховский режимы взаимодействия ударных волн, предложены методики оценки величины давлений и температур по «реперным» точкам, характерным для нагружаемого материала – как в области квазиодномерного, так и в области трёхмерного ударно-волнового движения. Показано, что додекаэдрическое ударно-волновое нагружение не уступает сферическому практически по всем значимым с точки зрения физики высоких давлений показателям при существенно более широком и интересном спектре проявляемых ударно-волновых эффектов.

Работа выполнена по плану РАН (тема «Структура», № г.р. 01201064335), при частичной финансовой поддержке РФФИ и Президиума РАН (проекты 11-03-00047 и 12-П-2-1009).

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МДП-СТРУКТУР $n - \text{GaAs} - \text{Ga}_2\text{O}_3$

Цупий С.Ю.* , Яскевич Т.М.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

*E-mail: s.veti.k@mail.ru

В работе было исследовано влияние температуры отжига на электрические характеристики структур металл-диэлектрик-полупроводник (МДП) и границу раздела $\text{GaAs} - \text{Ga}_x\text{O}_y$. Пленки оксида галлия наносили на установке термовакuumного напыления ВУП-4 путем распыления порошка Ga_xO_y β -фазы на подложки GaAs .

Осажденные слои Ga_xO_y были обработаны в плазме кислорода в течение 20 минут при температуре 50°C на установке Plasmalab 80 Plus Oxford Instruments, затем отожжены на установке УДО-3, предназначенной для проведения высокотемпературных отжигов в атмосфере аргона, при температурах 600°C , 700°C , 800°C и 900°C в течение 30 минут. Один из образцов был подвергнут сушке при 100°C в течение 15 минут.

Вольг-фарадные характеристики (ВФХ) исследовались с помощью автоматизированного комплекса, предназначенного для построения ВФХ, на базе измерителя LCR цифрового E7-12 на частоте 1 МГц. Полученные зависимости приведены на рисунке 1.

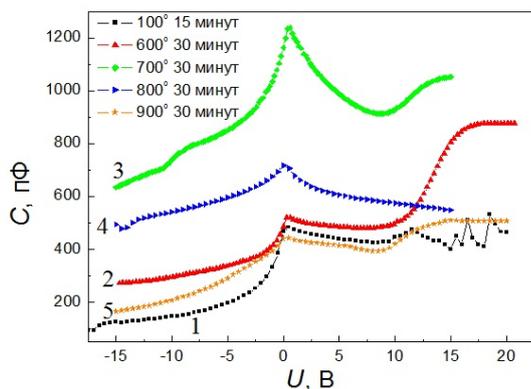


Рис. 1. ВФХ исследуемых образцов.

Из данных рисунка 1 следует, что емкость образцов (C), не подвергнутых отжигу при высокой температуре, при увеличении отрицательного потенциала на полевом электроде уменьшается, при приложении положительного – слабо зависит от напряжения (U). Емкость образцов, отожженных при 600°C , возрастает в интервале положительных потенциалов ($U \geq 10$ В) и стремится к насыщению при $U = 17$ В. В окрестности $U \approx 0$ В на зависимости $C(U)$ наблюдается пик, его величина возрастает с увеличением температуры отжига до 700°C .

Дальнейшее повышение температуры от 700°C до 900°C приводит к уменьшению емкости пика в окрестности $U \approx 0$ В на ВФХ. Значение емкости

при $U \approx 0$ В снижается с 1240 пФ при отжиге 700°C до 440 пФ при отжиге 900°C . Характерной особенностью ВФХ структур, отожженных при температурах выше 600°C , является слабая зависимость емкости от напряжения по сравнению с кривыми C от U после отжига при 600°C .

Особенности поведения $C(U)$ зависимостей после отжига при $T > 700^\circ\text{C}$ объясняются изменением структуры оксидной пленки и перестройкой границы раздела $\text{Ga}_2\text{O}_3 - \text{GaAs}$. Предположительно, вид графиков аналогичен $C-U$ кривым для изотипных гетеропереходов. Таким образом, в случае отжига при температурах более 700°C оксид галлия ведет себя как широкзонный полупроводник, который при контакте с $n - \text{GaAs}$ образует гетеропереход.

Неразрушающий контроль Неразрушающий контроль

~ o ~

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ТОПОГРАФИИ ПОВЕРХНОСТНЫХ ДЕФЕКТОВ ПРИ НОРМАЛЬНОМ НАМАГНИЧИВАЮЩЕМ ПОЛЕ

Агзамова П.А.*, Гобов Ю.Л., Реутов Ю.Я., Волков А.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: polina_agzamova@mail.ru

При решении задачи магнитостатического диагностирования ферромагнитных объектов в большинстве случаев измеряют топографию магнитных полей рассеяния от дефектов. По измеренной топографии магнитного поля восстанавливают форму, длину, глубину и раскрытие дефектов, используя различные методы решения обратной задачи магнитостатики.

Для намагничивания поверхности исследуемого объекта в большинстве случаев используется тангенциальное намагничивающее поле. Для эффективной работы устройств, использующих тангенциальное намагничивание, поверхность исследуемого объекта должна быть намагничена до насыщения, что увеличивает массу самого устройства и силу притяжения устройства к исследуемой поверхности. Кроме того, при тангенциальном намагничивании амплитуда полей рассеяния от дефектов зависит как от глубины, так и от формы дефекта, что существенно снижает точность определения глубины и формы дефекта.

Альтернативой для тангенциального намагничивания может быть нормальное намагничивание. При нормальном намагничивающем поле поверхность исследуемого изделия не намагничивается до насыщения, и материал остаётся магнитомягким с магнитной проницаемостью $\mu \sim 1000$. В таком случае поверхность исследуемого изделия становится эквипотенциальной поверхностью, и силовые линии магнитного поля входят перпендикулярно исследуемой поверхности.

В данной работе предложен способ восстановления топографии поверхностных дефектов при нормальном намагничивающем поле. Физическая сущность способа заключается в том, чтобы при сканировании поверхности снимать нормальную составляющую магнитного поля. Этой топографии достаточно для определения эквипотенциальной поверхности вблизи границы исследуемого объекта. Для этого необходимо восстановить топографию магнитного поля в сторону ферромагнитного объекта и построить эквипотенциальную поверхность с краевыми условиями на бездефектной области. Задача восстановления поля является «условно некорректной» по Тихонову [1] и решается с тем меньшей точностью, чем глубже надо восстанавливать поле. При нормальном намагничивании поле необходимо восстановить буквально на несколько миллиметров, что даёт достаточно высокую точность измерения.

На основании данного способа разработано и запатентовано [2] устройство для обнаружения поверхностных дефектов (с нормальным полем намагничивания), которое позволяет выявить дефекты внешней поверхности трубы и определить глубину и форму выявленного дефекта с высокой точностью. Кроме того, устройство позволяет определять как продольные, так и поперечные дефекты за одно сканирование.

1. Некорректные задачи естествознания, Под ред. Тихонова А.Н., Гончаренко А.В., Москва: Изд-во Моск. Ун-та (1987)
2. Гобов Ю.Л., Реутов Ю.Я., Грамматин А.В., Волков А.В., Агзамова П.А., Патент на полезную модель № 119885 (2012)

ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ МЕТОДА АКУСТИЧЕСКОЙ ТЕНЗОМЕТРИИ ПРИ КОНТРОЛЕ МЕТАЛЛОИЗДЕЛИЙ

Муравьев В.В., Балобанов Е.Н.*

Ижевский государственный технический университет им. М.Т. Калашникова, г. Ижевск, Россия

*E-mail: evgb87@gmail.com

Целесообразность контроля напряженного состояния металлоизделий в составе узлов железнодорожного транспорта, элементов сетей магистральных трубопроводов, объектов тяжелого машиностроения и энергомашиностроения продиктована задачей оценки их текущего технического состояния, поскольку зарождение и развитие усталостных трещин характеризуется ростом величины напряженного состояния в зоне локализаций их очагов.

Предложена методика на базе явления акустоупругости для контроля напряженного состояния крупногабаритных металлоизделий. В основе методики лежит установленная зависимость упругих свойств материала от величины напряженного состояния, что проявляется в изменении скорости распространения акустических волн в объекте. Величина изменения скорости зависит от типа волны, поляризации вектора смещений, характера прикладываемых напряжений (сжимающие, растягивающие). Например, при увеличении сжимающих напряжений на 1 МПа и поляризации вектора смещений сдвиговых волн вдоль направления действия прикладываемого усилия скорость уменьшится на $\approx 0.002\%$ или ≈ 0.06 м/с. На практике процедура измерения сводится к определению времени распространения акустических волн на известной базе.

Методика состоит в применении импульсов продольной волны и двух сдвиговых волн, плоско-поляризованных во взаимно перпендикулярных направлениях, лежащих в плоскости действия напряжений. Плоская поляризация вектора смещений сдвиговой волны позволяет добиться максимальной чувствительности к объемным тангенциальным напряжениям по пути распространения. Время распространения продольных волн используется в качестве вспомогательного параметра, позволяющего переводить время сдвиговых волн в действующие тангенциальные напряжения. Методика позволяет оценивать одноосное и двухосное напряженное состояние в плоскости, перпендикулярной направлению распространения акустических волн.

Точность измерений зависит от толщины объекта контроля, частоты ультразвуковых импульсов, разрешающей способности аппаратуры. Справедливым будет замечание, что чем меньше толщина объекта контроля, тем с большей точностью необходимо регистрировать времена распространения волн. Регистрация серии донных отражений и определения времени по дальним импульсам увеличивает базу прозвучивания и снижает инструментальную погрешность определения времени. При контроле остаточных напряжений необходимо учитывать фактор акустической анизотропии материала объекта. Акустическая анизотропия обусловлена необратимыми структурно-фазовыми превращениями в процессе производства, в результате обработки давлением и термической обработки. Фактор анизотропии выражается в единицах измерения напряжения и учитывается в виде дополнительного слагаемого при расчете напряженного состояния.

Экспериментальная методика опробована при контроле остаточных напряжений в ободьях железнодорожных цельнокатаных колес, бандажах локомотивных колес, осях колесных пар вагонов, а также при контроле напряжений в металлоизделиях, подвергающихся воздействию внешних нагрузок.

Работа выполнена при поддержке гранта Шумилова В.А. (рег. номер: ГТ – 1-12).

ОПТИМИЗАЦИЯ ВРЕМЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ СПЕКТРОМЕТРА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ПОЗИТРОНОВ В МАТЕРИАЛАХ

Бордулев Ю.С.* , Лаптев Р.С.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

*E-mail: bordulev@mail.ru

Методы электрон-позитронной аннигиляции применяются в материаловедении как эффективные технологии для неразрушающего контроля электронной структуры твердых тел. Измерение времени жизни позитронов в материале позволяет делать выводы о наличии объемных дефектов, их размерах и концентрации. С целью развития данного направления в 2001 году на базе лаборатории кафедры Общей физики Томского политехнического университета был реализован спектрометр для исследования времени жизни позитронов в материалах. Установка была выполнена по традиционной схеме с использованием быстрых интегральных дискриминаторов [1]. Временное разрешение такой схемы с использованием источника позитронов ^{22}Na с активностью 8 мкКи составляло 500 пс, что сильно ограничивало возможности применения данной установки. Было установлено, что существенный вклад в спектр вносят некоррелированные старт-стоп события. Сцинтилляционные детекторы Philips XR2020 на основе пластиковых сцинтилляторов были заменены на детекторы Hamamatsu H3378-50 (материал сцинтиллятора – BaF_2), имеющие лучшее энергетическое разрешение (Рисунок 1) и хорошие временные параметры. Также была произведена замена интегрального дискриминатора на дифференциальный на канале «Стоп». Оптимизация спектрометра заключалась в определении оптимальной геометрии детекторов, оптимального напряжения питания детекторов, настройке и калибровке отдельных модулей спектрометрического тракта и определении оптимальных порогов дискриминации.

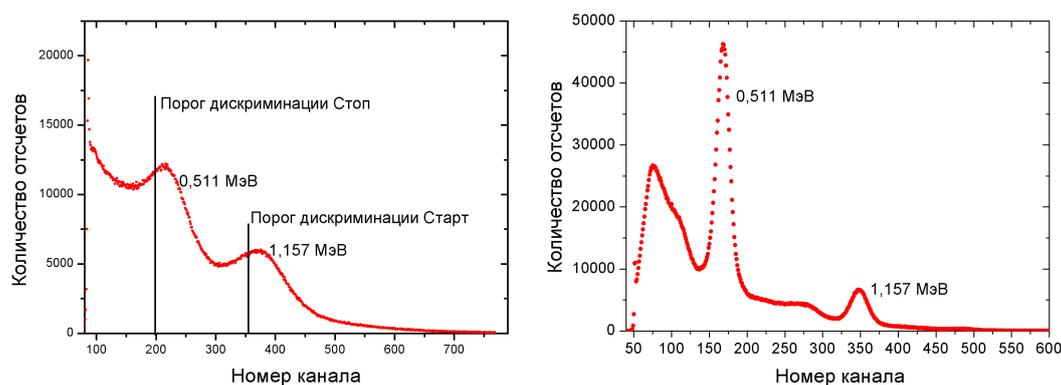


Рис. 1. Энергетические спектры с детекторов на основе пластиковых сцинтилляторов (слева) и BaF_2 (справа).

Проверка работоспособности комплекса проводилась с использованием калибровочного источника гамма-квантов ^{60}Co , аппаратное разрешение спектрометра составило 175 пс. Апробация комплекса была выполнена на калибровочных образцах чистого железа и титана. Разрешение спектрометра составило 260 пс, скорость счета 200 отсчетов/сек.

1. Krause-Rehberg R., Leipner H.S., Positron Annihilation in Semiconductors, Springer, Heidelberg (1999)

ВЛИЯНИЕ УПРУГО-ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА АУСТЕНИТНЫХ СТАЛЕЙ

Корх М.К.*, Огнева М.С., Степанова Н.Н., Ригмант М.Б.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: K_M_K@mail.ru

Стали аустенитного класса в настоящее время находят широкое применение в нефтегазовой отрасли, химическом машиностроении, судо- и авиастроении, атомной энергетике. Использование данных материалов обусловлено их способностью противостоять различным видам коррозии при высоком уровне прочностных и пластических свойств. В магнитном отношении аустенитные материалы относятся к разряду парамагнетиков и поэтому успешно применяются для производства конструкций, в которых требуется сочетание низкой магнитной проницаемости и строгой магнитной обстановки. Однако в процессе эксплуатации изделий из таких материалов под влиянием внешних воздействий (температуры и напряжений) в этих сталях могут происходить структурные и фазовые превращения, приводящие к появлению магнитных свойств.

Известно, что в ряде сталей и сплавов со структурой метастабильного аустенита при нагружении в области упругой и пластической деформации при температуре ниже точки деформационного мартенситного превращения развиваются фазовые переходы по типу $\gamma \rightarrow \alpha'$. При этом образуется, соответственно, мартенсит напряжения или мартенсит деформации. Мартенситные фазы деформации вызывают повышение интенсивности деформационного упрочнения, увеличивают способность к равномерному удлинению и при определенных условиях способствуют реализации эффекта пластичности превращения (аномальный рост относительного удлинения с понижением температуры испытания ниже точки появления мартенсита).

В отличие от системы Fe – Ni, для метастабильных сталей и сплавов на Fe – Mn, Fe – Mn – Cr основе изменение магнитной фазы в процессе нагружения в области упругих и малых пластических деформаций подробно не изучалось. Авторами на примере трех деформационно-метастабильных сталей на основе Fe – Mn и Fe – Mn – Cr с двухфазной аустенитной структурой показано, что образование ферромагнитного мартенсита деформации наблюдается уже в макроупругой области при напряжениях, близких к величине условного предела текучести $\sigma_{0.2}$. А наиболее активный прирост содержания мартенсита деформации при растяжении образцов наблюдается в условиях локализации деформации (в момент образования шейки), что связано с изменением напряженного состояния из-за повышения доли растягивающих напряжений и интенсивным развитием пластической деформации.

Содержание ферромагнитной мартенсит-деформационной фазы может служить количественной оценкой степени деформационного воздействия.

Также из проведенных исследований можно сделать однозначный вывод: исследуемые стали являются непригодными для применения в установках со строгой магнитной защитой. В частности, не могут быть использованы для изготовления труб горизонтального и наклонного бурения, так как уже небольшие пластические деформации могут привести к появлению в составе материала трубы больших объемных включений ферромагнитной фазы мартенсита деформации (α' -Fe).

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований – Проект 11-02-12189-офи-м-2011.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ МАГНИТОСТАТИКИ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ МОДЕЛЕЙ ДЕФЕКТНЫХ ТЕЛ С ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ СИММЕТРИЕЙ

Кудряшова О.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ovu@imp.uran.ru

Для нужд магнитного контроля качества изделий и по сей день сохраняется важность разработки эффективных методов решения соответствующих теоретических задач. Они формулируются и решаются в рамках магнитостатики. Задавая геометрическую модель дефектного тела, определяясь с моделью физических свойств среды и с внешним полем, приступают к решению задачи по определению результирующего поля. Математическая постановка осуществляется либо на основе дифференциальных уравнений, либо на основе одного интегро-дифференциального уравнения. Причём, последний подход в настоящее время используется все чаще, поскольку заключает в себе неоспоримые преимущества.

Был разработан эффективный алгоритм решения задач для следующих моделей: бесконечно протяжённых цилиндра (задача первая) или трубы (задача вторая). Полагалось, что внутри таковых магнитных тел находится включение, бесконечно протяжённое вдоль оси симметрии, сечение которого плоскостью, перпендикулярной этой оси, неизменно и ограничено гладким контуром. Для такого случая за основу берётся двумерное интегро-дифференциальное уравнение магнитостатики, отправляясь от которого, выведены интегро-дифференциальные уравнения для цилиндра и трубы, свободные от интегральных слагаемых, в которых интеграл берётся по контуру, ограничивающему сечение цилиндра или трубы. Остаётся только один интегральный оператор — с интегралом по контуру, ограничивающему сечение модельного включения. И это хорошо, поскольку таким образом снижается число функций, которые требуется знать для вычисления результирующего поля. Остаётся искать только нормальную составляющую на границе сечения дефекта. Для поиска этой функции получены уравнения: одно — для цилиндра, другое — для трубы. Эти уравнения были рассмотрены для случая, когда сечение дефекта имеет форму круга. На их основе выведены алгебраические системы уравнений для поиска коэффициентов разложения нормальной составляющей в ряд по тригонометрическим функциям. Получены выражения для вычисления компонент результирующего поля.

Эффективность алгоритма заключается в возможности получения результирующего поля с контролируемой точностью. При минимальных затратах машинного времени получается результат с шестнадцатью устойчивыми значащими цифрами.

Задача о цилиндре уже опубликована [1], а задача о трубе выйдет в одиннадцатом номере в том же журнале.

1. Дякин В.В., Кудряшова О.В., Дефектоскопия, 4, 41-55 (2012)

ИМПУЛЬСНОЕ ПОДМАГНИЧИВАНИЕ ДЛЯ ЭМАП

Михайлов А.В.*, Гобов Ю.Л., Смородинский Я.Г.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Возбуждение и прием ультразвуковых волн электромагнитно-акустическим (ЭМА) способом является, на сегодняшний день, актуальной задачей для неразрушающего контроля ферромагнитных объектов. Одной из особенностей ЭМА преобразования (ЭМАП) является необходимость в использовании подмагничивания.

Существует два механизма ЭМАП: магнитострикционный, в котором применяется тангенциальное подмагничивающее поле, а также электродинамический, требующий нормального, по отношению к поверхности контролируемого изделия, подмагничивающего поля. Если рассматривать тангенциальное подмагничивание, в качестве намагничивающей системы можно применять П-образный постоянный или электромагнит, но такая система будет работать либо на тонкостенных ферромагнитных объектах, либо будет обладать большими размерами и массой. Поэтому для ЭМАП обычно применяют либо нормальное, либо слабое тангенциальное поляризуемое поле.

Для ЭМАП чаще всего создается нормальное подмагничивающее поле с помощью высокоэнергетичных постоянных магнитов, но из-за того, что для эффективного ЭМАП необходимы достаточно большие поля (более $5 \cdot 10^5$ А/м для нормального подмагничивания), такие системы громоздки и сильно притягиваются к контролируемому объекту. Как следствие, возникают трудности со снятием и установкой средства неразрушающего контроля на поверхность изделия, а также засорение ЭМА датчиков ферромагнитной стружкой и пылью. Если использовать импульсное подмагничивание, этих проблем можно избежать.

Как при нормальном, так и при тангенциальном подмагничивании возможно возбуждать объемные поперечные волны и волны Лэмба и Релея, а при тангенциальном, в том числе импульсном подмагничивании, возможно возбуждение и поперечных нормальных волн.

В данной работе предложена импульсная намагничивающая система для ЭМАП с тангенциальным подмагничивающим полем.

Поле в такой системе создается импульсным током с длительностью импульса порядка 100 мкс, при этом происходит намагничивание скин-слоя объекта контроля до полей порядка $3 \cdot 10^4$ А/м. При импульсном намагничивании материал на глубине скин-слоя намагничивается до насыщения, поэтому оптимизацию следует производить с учетом существенной нелинейности кривой намагничивания материала.

Такая намагничивающая система может работать на ферромагнитных материалах любой толщины и обладает небольшими размерами и малым электропотреблением.

Проведенная оптимизация размеров системы, а так же лабораторные испытания показали её высокую эффективность для ЭМАП. При этом вес системы составляет всего 200 грамм. В результате была создана компактная намагничивающая система, позволяющая возбуждать ультразвуковые волны ЭМА методом более эффективно, чем при подмагничивании нормальным полем величиной 10^6 А/м.

БЕСКОНТАКТНАЯ ДЕФЕКТОСКОПИЯ НЕФТЕГАЗОПРОВОДОВ НА БАЗЕ ПРОТОННОГО ОВЕРХАУЗЕРОВСКОГО МАГНИТОМЕТРА ММРОС

Нархов Е.Д.*, Сапунов В.А., Денисов А.Ю.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: narhoved.ftf@gmail.com

В настоящее время в России эксплуатируется порядка 350000 километров магистральных транспортных трубопроводов. По данным Ростехнадзора РФ, уровень аварийности различных трубопроводных систем находится в пределах от 0.13 до 150 разрушений на 1000 км в год, что стимулирует развитие новых методов дефектоскопии. Сейчас наиболее распространены методы внутритрубной дефектоскопии, которые отличаются высокой стоимостью и трудоемкой подготовкой объекта к исследованию. Также развиваются и уже нашли применение бесконтактные магнитометрические методы мониторинга трубопроводов с поверхности земли без вскрытия грунта. В основе метода лежит измерение аномалий геомагнитного поля, обусловленных намагниченностью трубы, в частности с помощью протонных геомагнитометров [1]. В работе [2] для дефектоскопии газопроводов и обнаружения сварных швов продемонстрирована перспективность применения протонных оверхаузеровских квантовых магнитометров геомагнитного поля, обусловленная их высокой градиентоустойчивостью.

Современный метод бесконтактной дефектоскопии, основанный на применении компонентных феррозондовых магнитометров-градиентометров, находит расширяющееся применение для определения различных дефектов (коррозионные пятна, язвы, дефекты сварного шва и т.д.) и утвержден МИНЭНЕРГО РФ [3].

В отличие от существующих методик, предлагается использование градиентометрического оборудования на базе скалярного квантового оверхаузеровского многоканального магнитометра, позволяющего измерять абсолютные значения индукции поля и градиенты модуля поля между датчиками (каналами). Для получения достоверных данных в условиях высокого градиента с помощью такого многоканального магнитометра требуется анализ взаимосвязи чувствительности магнитометра и градиента измеряемого поля. В докладе представлены экспериментальные результаты по связи чувствительности и градиента, полученные на лабораторном эталоне магнитного поля. Сформулированы критерии градиентоустойчивости, показывающие возможность работы непосредственно над трубопроводами на высоте до 1 – 2 метров, подтвержденные 5-летним опытом использования одноканальных магнитометров ММРОС-1, адаптированных под условия применения.

В докладе сформулированы направления модернизации стандартного геологоразведочного оборудования для дефектоскопического применения в условиях высоких градиентов. В частности, несмотря на отсутствие требований углового позиционирования оверхаузеровских датчиков модуля магнитного поля, в присутствии градиента важным требованием применения многоканальных оверхаузеровских градиентометров является точность их углового позиционирования. Приводятся результаты модельных расчетов градиентов дипольных аномалий, и показано, что требования к позиционированию много ниже, чем для применяемых в настоящее время феррозондовых градиентометров СКИФ, а информативность не хуже при улучшении условий применения.

1. David L. Atherton, Teitsma A., J. Appl. Phys., **53**, 11 (1982)
2. Некрасов И.А., Денисов А.Ю., Киселев С.Е., Сапунов В.А., Дефектоскопия, **3**, 45 (1998)
3. РД102-008-2002 «Инструкция по диагностике технического состояния трубопроводов бесконтактным магнитометрическим методом» (2002)

ВЛИЯНИЕ ОРТОГОНАЛЬНОГО ПОДМАГНИЧИВАЮЩЕГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕССЫ СМЕЩЕНИЯ РАЗНОГО ТИПА ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ ПРИ НАМАГНИЧИВАНИИ ПЛАСТИЧЕСКИ ДЕФОРМИРОВАННОЙ НИЗКОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ

Сташков А.Н., Ничипурук А.П.* , Огнева М.С.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Изучение поведения магнитных свойств низкоуглеродистых сталей, подверженных пластической деформации, в настоящее время остается актуальной задачей. Известно, что основную роль в появлении перегиба на петлях гистерезиса деформированной низкоуглеродистой стали играют остаточные механические напряжения [1]. Механические напряжения воздействуют на 90-градусные доменные стенки, соответственно наибольшую чувствительность к величине деформации имеет величина критического поля смещения 90-градусных доменных границ. Для развития магнитных методов неразрушающего контроля действующих и остаточных напряжений крайне важным вопросом является отдельная оценка вкладов в процессы перемагничивания 180 и 90-градусных доменных границ, количественная оценка их соотношения, определение среднего размера доменов и величин критических полей смещения этих границ.

Данная работа направлена на развитие методов, позволяющих приблизиться к экспериментальному определению степени пластической деформации в сталях, вызванной растягивающими нагрузками. Исследована анизотропия магнитных свойств при намагничивании предварительно деформированных образцов из низкоуглеродистой стали ст.20. Новизна работы заключается в том, что в эксперименте к образцам дополнительно прикладывалось подмагничивающее поле в перпендикулярном направлении по отношению к намагничивающему полю. Амплитуда подмагничивающего поля варьировалась от величины, сопоставимой с коэрцитивной силой материала, до величин, в несколько раз превышающих ее. Для реализации метода ортогонального подмагничивания была создана установка, позволяющая измерять полевые зависимости дифференциальной магнитной проницаемости в 2-х взаимно-перпендикулярных направлениях с использованием идентичных первичных П-образных преобразователей. При проведении измерений один из преобразователей, установленных на образце, создавал постоянное подмагничивающее поле, а второй намагничивал со скоростью 9 А/(см·сек) образец до технического насыщения.

Установлено, что полевые зависимости дифференциальной магнитной проницаемости, измеренные поперек предварительного растяжения образца и при действии ортогонального подмагничивающего поля, существенно отличаются от зависимостей, измеренных в его отсутствие. Действие подмагничивающего поля приводит к перераспределению соотношения 180 и 90-градусных переходов в материале и появлению второго максимума на этих зависимостях для образцов с различной степенью деформации. На смещение 90-градусных доменных границ существенно влияет величина поля подмагничивания. С его помощью появляется возможность управлять объемом областей металла, перемагничивающихся путем смещения доменных границ на 180 градусов. При фиксированном значении ортогонального подмагничивающего поля объем этих областей существенно зависит от величины остаточных напряжений, возникающих в материале после пластической деформации.

Работа выполнена при частичной поддержке Проекта Президиума РАН 12-П-2-1301, проекта по программе ОФИ № 12-2-036-УВГ, гранта РФФИ № 12-08-31552 мол_а.

1. Ничипурук А.П., Сташков А.Н., Костин В.Н., Корх М.К., Дефектоскопия, **9**, 31-38 (2009)

ВЛИЯНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА
МАРТЕНСИТНО-СТАРЕЮЩИХ СТАЛЕЙ

Сташков А.Н.*, Сомова В.М., Сажина Е.Ю., Сташкова Л.А., Огнева М.С., Ногин В.С.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Мартенситно-стареющие стали широко используются в судостроении, авиационной промышленности, ракетостроении. Механические свойства таких сталей в значительной степени определяются количеством остаточного аустенита, его устойчивостью и степенью легирования. Поэтому для изделий из указанных сталей разрабатывается технологический процесс, в результате которого в их микроструктуре количество остаточного аустенита регламентируется в достаточно узком интервале, и тем самым достигается оптимальное сочетание механических свойств. В работе [1] был предложен новый метод неразрушающего контроля количества остаточного аустенита стали ВНС-2УШ (08X15H5Д2Т) с использованием в качестве параметра контроля внутреннего коэффициента размагничивания N_i .

Детали из мартенситно-стареющих сталей в процессе эксплуатации подвергаются действию циклических и статических знакопеременных механических нагрузок, которые могут приводить к структурным изменениям в этих сталях. Например, под действием деформации может измениться количество остаточного аустенита, что, в свою очередь, может привести к ухудшению механических свойств стали и разрушению детали. Поэтому важной задачей является эксплуатационный контроль фазового состава мартенситно-стареющих сталей. Данная работа посвящена исследованию влияния пластической деформации на магнитные свойства и фазовый состав образцов стали ВНС-2УШ (08X15H5Д2Т) с изначально разным содержанием остаточного аустенита. Для получения образцов с различным количеством остаточного аустенита (от 7 до 22 %) исходные образцы подвергали термообработке: отжигу, закалке и старению. При этом варьировалась как температура термообработки, так и время выдержки, а при отжиге и скорость нагрева. Количество остаточного аустенита в образцах определяли рентгенографически на дифрактометре типа ДРОН. Магнитные характеристики (коэрцитивную силу H_c , индукцию насыщения B_s и остаточную индукцию B_r) определяли на баллистической установке. Измерения полевых зависимостей дифференциальной магнитной проницаемости и величину внутреннего коэффициента размагничивания N_i определяли на разработанной в Институте физики металлов УрО РАН установке с использованием в качестве намагничивающего устройства пермеметра.

Установлено, что при увеличении степени деформации (вплоть до разрушения) увеличивается индукция насыщения образцов и уменьшается внутренний коэффициент размагничивания, что свидетельствует об уменьшении количества неферромагнитной фазы (аустенита). Чем больше содержание остаточного аустенита в недеформированных образцах, тем интенсивнее изменение магнитных свойств при степенях деформации до 4 %. При дальнейшем увеличении степени деформации изменений практически не происходит, что свидетельствует о стабилизации фазового состава материала. Применение средств экспрессного локального измерения магнитных параметров позволит применять на практике метод контроля степени деформации мартенситно-стареющих сталей.

Работа выполнена при частичной поддержке Проекта Президиума РАН 12-П-2-1301, проекта по программе ОФИ № 12-2-036-УВГ, гранта РФФИ № 12-08-31552 мол. а.

1. Сташков А.Н., Сомова В.М., Сажина Е.Ю., Сташкова Л.А., Ничипурук А.П., Дефектоскопия, **12**, 36-42 (2011)

КОЭРЦИТИМЕТР С ВОЗМОЖНОСТЬЮ ОТСТРОЙКИ ОТ ЗАЗОРА МЕЖДУ ПРИСТАВНЫМ ЭЛЕКТРОМАГНИТОМ И КОНТРОЛИРУЕМЫМ ИЗДЕЛИЕМ

Сташков А.Н.*, Ефремов А.В., Ничипурук А.П., Ногин В.С.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Разработан и изготовлен опытный образец микропроцессорного магнитного структуроскопа-коэрцитиметра КИФМ-1Н. Прибор предназначен для решения задач контроля режимов термообработки стальных изделий, контроля параметров поверхностно-упрочненных слоев, механических свойств стальных изделий, контроля одноосных механических напряжений. Отличием данного прибора от ранее изготавливаемых в Институте физики металлов УрО РАН является возможность автоматической отстройки от случайного зазора (до 1.5 мм), возникающего между контролируемым изделием и полюсами первичного преобразователя приставного типа. Конструктивно прибор состоит из двух блоков: приставного П-образного электромагнита с размерами полюсов 12×28 мм² и электронного блока. Существует возможность комплектовать прибор электромагнитом с размерами полюсов 20×40 мм² для контроля крупногабаритных изделий. Алгоритм, позволяющий проводить отстройку от зазора, кратко описан в работах [1, 2] и состоит в следующем: перемагничивание контролируемого изделия производится не до состояния, соответствующего нулевому потоку замкнутой магнитной цепи электромагнит – изделие, а до состояния, для которого характерно пересечение спинок петель гистерезиса при разных зазорах. Для образцов с разным значением коэрцитивной силы точки пересечения спинок петель гистерезиса лежат на одной прямой [2]. Уравнение этой прямой заносится в память прибора при настройке и используется в измерениях коэрцитивной силы контролируемых объектов: перемагничивание проводится до момента пересечения нисходящей ветви петли гистерезиса с калибровочной прямой. Диапазон измерения коэрцитиметра КИФМ-1Н составляет 200 – 4000 А/м, относительная погрешность не более ± 5 %. Заложенный в прибор алгоритм работы позволяет уменьшить влияние зазора в $21 \div 162$ раза (в зависимости от коэрцитивной силы образца) по сравнению с классическим способом измерения коэрцитивной силы.

Коэрцитиметр КИФМ-1Н прошел апробацию на Кушвинском заводе прокатных валков. Возможность отстройки от зазора позволила успешно применить прибор для контроля однородности распределения коэрцитивной силы на рабочем слое валков на разных стадиях их производства: после литья (валки с грубой шероховатой поверхностью), после термообработки и после шлифовки. Такой пооперационный контроль позволяет отследить отклонение технологических параметров от нормы и улучшить качество выпускаемых изделий.

Работа выполнена при поддержке молодежного инновационного проекта УрО РАН № И-3, проекта Президиума РАН 12-П-2-1301, проекта по программе ОФИ № 12-2-036-УВГ, гранта РФФИ № 12-08-31552 мол_а.

1. Ничипурук А.П., Бида Г.В., Царькова Т.П., Гобов Ю.Л., Сташков А.Н., Поволоцкая А.М., Дефектоскопия, **8**, 45-53 (2010)
2. Сташков А.Н., Ногин В.С., Тез. докл. XII Всероссийской молодёжной школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-XII), г. Екатеринбург, с. 135 (2011)

Теплофизические свойства веществ

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

~ o ~

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОПТОВОЛОКОННОГО ДАТЧИКА ДЛЯ КОНТРОЛЯ РАСТВОРИМОСТИ ГАЗОВ В ЖИДКОСТЯХ

Акашев А.А.

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: akashev.anton@gmail.com

Исследование и контроль растворимости газов в жидкости является важной проблемой в различных сферах деятельности человека. Примером могут послужить такие сферы, как разработка нефтяных и газовых месторождений, экологические аспекты работы промышленности и т. д. Рост оптоэлектронной и оптоволоконной промышленности привел к возможности применения оптоволоконна в системах контроля различных физических величин. Оптоволоконные датчики обладают малыми размерами, широким диапазоном рабочих параметров и могут быть использованы при решении широкого круга экспериментальных задач.

Представляемая работа была посвящена исследованию принципиальной возможности контроля растворимости газов в жидкостях при помощи оптоволоконного датчика. Была собрана экспериментальная установка, и с ее помощью проведена серия экспериментов по определению растворимости азота в воде. На основе экспериментальных данных сделано заключение о применимости оптоволоконного датчика в системах контроля растворимости газов в жидкостях.

Эксперименты включали в себя регистрацию изменения сигнала датчика в зависимости от различных комбинаций параметров системы. Основными параметрами являлись температура, давление, время эксперимента. На рис. 1 представлена регистрация датчиком процесса насыщения воды азотом. Эксперимент проводился при постоянной температуре 8.6°C, давление изменялось скачком с 10 до 20 атм. Видно, что датчик чувствует как изменение давления, так и процесс насыщения, выраженный в возрастании величины сигнала со временем после подачи давления в 20 атм.

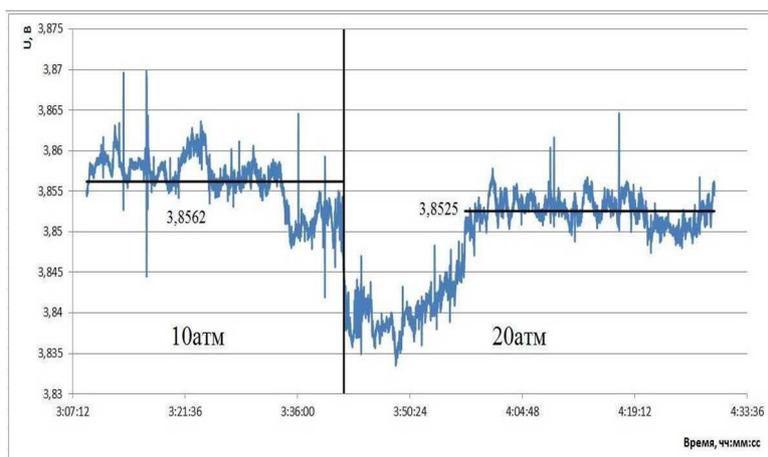


Рис. 1. Регистрация процесса насыщения воды азотом.

На основе проделанных экспериментов можно утверждать, что оптоволоконный датчик позволяет, по крайней мере, качественно фиксировать изменение количества растворенного газа в жидкости.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ УГЛЕРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Аливердиев А.А.^{1,2*}¹Институт проблем геотермии ДНЦ РАН, г. Махачкала, Россия²Институт физики им. Х. Амирханова ДНЦ РАН, г. Махачкала, Россия*E-mail: aliverdi@mail.ru

Уравнение состояния углерода представляет интерес для многих областей физики и техники, включая астрофизику (описание фаз высокого давления играет ключевую роль для построения реалистичных моделей звезд и планет, включая объяснение аномально большого магнитного поля у таких планет как Уран и Нептун), материаловедение, прикладную инженерию (включая технологии контролируемого термоядерного синтеза) и др. Важное явление металлизации углерода при высоких давлениях было теоретически предсказано давно, но до сегодняшнего дня все еще существуют трудности с его экспериментальной проверкой. Наиболее принятая на сегодняшний день фазовая диаграмма углерода Грюмбаха и Мартина [1] устанавливает структурное превращение в жидком углероде в металлическую фазу при давлениях порядка 4 – 10 Мб. Экспериментальные исследования по уравнению состояния углерода при давлениях порядка 10 Мб, получаемых посредством мощных лазерных импульсов, приведены в [2]. Цель данной работы состояла в моделировании процессов, имеющих место в таких экспериментах с учетом лучистого транспорта и реальной формы профиля лазерного импульса [3], что должно позволить: (i) проверить табулированное уравнение состояния углерода, взятое за основу, (ii) найти влияние лучистого транспорта, а также профиля лазерного импульса на возможную регулярную ошибку, (iii) сравнить полученные данные с результатами недавних экспериментов, и (iv) в конечном счете, уточнить табулированное уравнение состояния, принимая во внимания последние эксперименты [4, 5].

Показано, что расхождения последних экспериментальных данных с теоретическими предсказаниями могут быть результатом регулярной ошибки, вызванной как наличием лучистого теплообмена, так и непрямоугольным временным профилем лазерного импульса (реально в эксперименте использовались гауссовы профили) особенно при интенсивностях $> 10^{14}$ Вт/см². Влияние временного профиля лазерного импульса представляется более существенным. Если ударная волна успеет достигнуть стационарного режима при достижении первой ступени мишени, то задержка, связанная с формой профиля, будет одинаковой для всех ступеней, и будет автоматически вычтена. Однако в противном случае она может привести к достаточно существенным ошибкам при вычислении скорости ударных волн и, соответственно, всех дальнейших расчетов. Анализ результатов моделирования для различных параметров лазерного импульса и поиск их оптимальных значений приводятся в докладе.

Автор выражает глубокую признательность проф. Д. Батани, а также сотрудникам группы лазерной плазмы физического факультета университета Милана-Бикокка за плодотворную совместную работу. Автор также благодарен ESF (SILMI, 3964) и РФФИ (12-01-96500) за частичную поддержку его исследований.

1. Grumbach M. and Martin R., Phys. Rev. B **54**, 15730-15741 (1996)
2. Batani D. et al., Phys. Rev. Lett. **62**, 065503 (2004)
3. Aliverdiev A. et al., Phys. Rev. E **78**, 046404 (2008)
4. Aliverdiev A. et al., Radiat. Eff. and Def. in Sol. **165**, 566 (2010)
5. Aliverdiev A. et al., Nukleonika **56**, 165 (2011)

МАГНЕТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ ДЛЯ ОХЛАЖДЕНИЯ
ПРИ ОКОЛОКОМНАТНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХАливердиев А.А.^{1,2*}¹Институт проблем геотермии ДНЦ РАН, г. Махачкала, Россия²Институт физики им. Х. Амирханова ДНЦ РАН, г. Махачкала, Россия*E-mail: aliverdi@mail.ru

В основе магнетокалорического эффекта (МКЭ) лежит адиабатическое изменение температуры и энтропии магнитного материала в результате перераспределения внутренней энергии между системой магнитных моментов атомов и кристаллической решеткой при наложении или снятии внешнего магнитного поля. Максимальной величины МКЭ достигает при температурах магнитного фазового перехода. С открытием МКЭ в 1881 году [1] он в ряде случаев успешно применялся для охлаждения главным образом при низких (менее 20 К) температурах [2]. Прототип, демонстрирующий, что магнитное охлаждение может выступить конкурентоспособной технологией в сравнении с традиционными средствами при околокомнатных температурах, был представлен лабораторией Эймса в 1997 [3]. Дальнейшие работы по магнитному охлаждению велись как в вопросах конструирования тепловой машины, так и в поиске лучшего рабочего тела – материалов с выраженным МКЭ при комнатных температурах и приемлемой стоимостью [4, 5].

Для исследованных соединений $\text{La}_{1-x}\text{Ag}_x\text{MnO}_3$ ($y \leq x$) [6] при изменении магнитного поля 2.6 Тл величина магнетокалорического охлаждения при адиабатических условиях в точке фазового перехода (в зависимости от состава от 265 К до 303 К) составила от 1.4 до 2.7 К, что в 2 – 3 раза меньше максимального адиабатического магнетокалорического охлаждения для чистого гадолиния при том же изменении поля. Тем не менее, при сопоставимой с гадолинием ширине эффекта (более 20 К для семидесятипроцентного диапазона от максимума) и возможности существенного снижения стоимости манганитов при промышленном производстве результаты представляются достаточно обнадеживающими, в том числе в сравнении с результатами исследований, проведенных лабораторией Эймса по другим классам соединений [7].

1. Warburg E., Ann. Phys. **13**, 141 (1881)
2. Debye P., Ann. Phys. **81**, 1154 (1926); Giauque W.F., J. Am. Chem. Soc. **49**, 1870 (1927)
3. Zimm C. et al., Adv. Cryog. Eng. **43**, 1759-1766 (1998)
4. Pecharsky V.K. and Gschneidner K.A. Jr., Magnetocaloric materials. In: H. Kronmüller, S. Parkin (Eds.), Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials. Novel Materials, **4**. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, England, 2363 (2007)
5. Tishin A.M., Magnetocaloric effect in the vicinity of phase transitions. In: K.H.J. Buschow (Eds.), Handbook of Magnetic Materials, **12**. Elsevier Science B.V., Amsterdam, 395-524 (1999)
6. Kamilov I.K., Gamzatov A.G., Aliev A.M., Batdalov A.B., Aliverdiev A.A., Abdulgagidov Sh.B., Melnikov O.V., Gorbenko O.Yu., and Kaul A.R., J. Phys. D: Appl. Phys. **40**, 4413 (2007)
7. Madireddi S.C. Graduate Theses and Dissertations. Paper 11414 (2010)

ПРОФИЛИ ПЛОТНОСТИ, ПАРАМЕТР ТОЛМЕНА И ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ НА ПЛОСКИХ И ИСКРИВЛЕННЫХ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦАХ КИСЛОРОДА, АЗОТА И ИХ РАСТВОРОВ

Андбаева В.Н.

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: andbaeva@mail.ru

Одним из основных параметров межфазной границы является поверхностное натяжение. В данной работе градиентная теория капиллярности Ван-дер-Ваальса используется для описания свойств межфазной границы жидкость–пар в растворах кислород–азот с концентрациями азота x_L в растворе от 0 до 1 мол. долей. Данная работа обобщает ранее полученные результаты [1] с новыми.

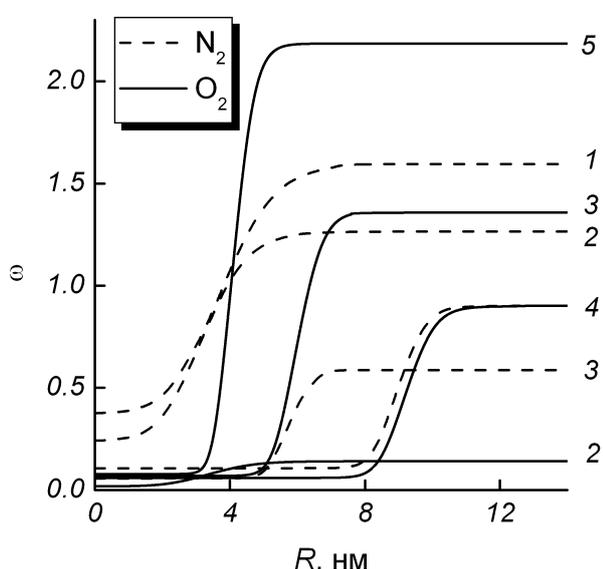


Рис. 1. Профили плотности в растворе кислород–азот при $T = 120$ К: 1 – $x_L = 1.0$ мол. долей, $p = 2.1$ МПа; 2 – 0.9, 1.5; 3 – 0.3, 0.0; 4 – 0.5, 1.0; 5 – 0.0, -2.0.

Распределения плотности первого и второго компонентов в искривленном межфазном слое жидкость–пар раствора кислород–азот показаны на рис. 1. Здесь ω – безразмерная плотность. Профили плотности являются монотонными функциями. Для представленных параметров раствора видно, что радиус зародышей составляет порядка 3–9 нм. При постоянных значениях T и x_L радиус зародышей увеличивается. Зная распределение плотности, можно определить работу образования критических зародышей, рассчитать поверхностное натяжение на искривленной межфазной границе.

В работе представлены значения параметра Толмена δ , полученные как для плоского случая, так и для случая искривленной межфазной границы. Расстояние между эквимолекулярной разделяющей поверхностью и поверхностью натяжения $\delta = R_{\omega} - R$ существенно зависит от кривизны поверхности раздела. К примеру, для $T = 120$ К, $x_L = 1.0$, $p = 2.1$ МПа получено, что $\delta = -0.012$ нм, а уже для давления $p = 2.2$ МПа – $\delta = 0.353$ нм. Положительные значения параметра Толмена говорят о том, что поверхность натяжения располагается ближе к центру зародыша, чем эквимолекулярная поверхность. При постоянной температуре при увеличении давления $\delta = f(p)$ является монотонно возрастающей функцией.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 12-02-90413-Укр_а).

1. Baidakov V.G., Andbaeva V.N., Fluid Phase Equilib., **286**, 175 (2009)

ИСТЕЧЕНИЕ ПЕРЕГРЕТОЙ ВОДЫ ИЗ КОРОТКОГО ЩЕЛЕВОГО КАНАЛА ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВНЕШНИХ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

Решетников А.В., Бусов К.А.* , Мажейко Н.А.

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: kbusov@mail.ru

Истечение жидкостей через насадки находит самые различные применения в технике и технологиях. Особый интерес представляет изучение истечения перегретых жидкостей, т.к. необходимо знание закономерностей поведения струйных течений для ликвидации последствий аварийных ситуаций, возникающих при разгерметизации сосудов высокого давления (трубопроводы, ядерные реакторы).

В ранее проведенных экспериментах [1] было установлено наличие кризисных явлений (полный развал струи, кризис реактивной отдачи) в истекающем потоке перегретых жидкостей, прошедших через короткий цилиндрический канал (длина $l = 0.7$ мм, диаметр $d = 0.5$ мм). При замене короткого цилиндрического канала на короткий щелевой канал с неизменной внешней геометрией за выходным срезом кризисные явления в истекающей среде отсутствовали (рис. 1а). При отсутствии плоскости за щелевым каналом струя горячей воды распространялась как в осевом, так и в радиальном направлениях (рис. 1б). Форма истекающей среды была близка к эллиптическому параболоиду. Экспериментальные значения реактивной силы струи перегретой воды хорошо описывались гидравлическим приближением. Установив смежную плоскость с выходным срезом канала (рис. 1в), реактивная сила струи с ростом температуры вдоль линии насыщения имела постоянное значение ($F = 0.5$ Н) до температуры $T_{0s} = 240^\circ\text{C}$. Для данной температуры величина реакции струи скачком возрастала (кризис реактивной тяги) и описывалась газовым приближением.

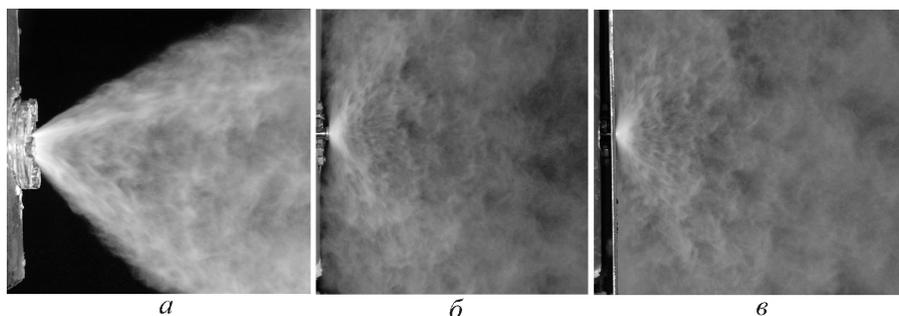


Рис. 1. Формы струй перегретой воды при истечении через короткий щелевой канал при температуре $T_{0s} = 240^\circ\text{C}$ на линии насыщения для различной внешней геометрии за каналом: а) наличие плоскости за выходным срезом канала со ступенькой и расширяющейся диффузорной частью; б) отсутствие плоскости; в) наличие прилегающей плоскости.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 11-08-00002-а).

1. Решетников А.В., Мажейко Н.А., Бусов К.А., Коверда В.П., Роечко В.В., Кризисные явления в струе вскипающих водных растворов, Труды пятой Российской национальной конференции по теплообмену РНКТ-5, Москва, 4, 153-156 (2010)

КАПИЛЛЯРНАЯ ПОСТОЯННАЯ И ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ РАСТВОРА МЕТАН-ГЕЛИЙ

Гришина К.А.* , Якимова Е.Н.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: kgrishina@mail.ru

Изучение компонентов природного газа имеет большое значение как в топливно-энергетической промышленности, так и в исследовании свойств газонасыщенных растворов при низких температурах.

В данной работе представлены результаты измерения капиллярной постоянной и расчета поверхностного натяжения раствора метан-гелий. Капиллярная постоянная измерялась в температурном интервале 95 – 175 К при давлениях до 4 МПа. На начальном этапе происходило заполнение экспериментальной ячейки метаном, а затем после конденсирования и установления заданной температуры порциями производился напуск гелия. Измерения производились для чистого метана и после каждого напуска порции гелия.

На основании результатов эксперимента и расчета ортобарических плотностей жидкой и газообразной фаз было получено поверхностное натяжение раствора.

В результате измерений было зафиксировано повышение капиллярной постоянной раствора по сравнению с чистым веществом при увеличении давления и увеличении концентрации гелия.

На рис. 1 приведены результаты измерения капиллярной постоянной раствора метан-гелий.

Наклон концентрационной зависимости капиллярной постоянной, представленной на графике, с увеличением температуры монотонно уменьшается и ближе к высоким температурам становится почти параллельным оси абсцисс.

Концентрации компонентов раствора были определены по давлению насыщения путем аппроксимации литературных данных для системы метан-гелий [1, 2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 12-08-31261-мол_a, 12-02-90413-Укр_a) и программы УрО СО РАН (проект № 12-С-2-1001).

1. DeVaney W.E., Rhodes H.L., Tully P.C., Journal of chemical and engineering data, **16**, 2, 158 (1971)

2. Heck S.K., Hiza M.J., AIChE Journal, **13**, 3, 593 (1967)

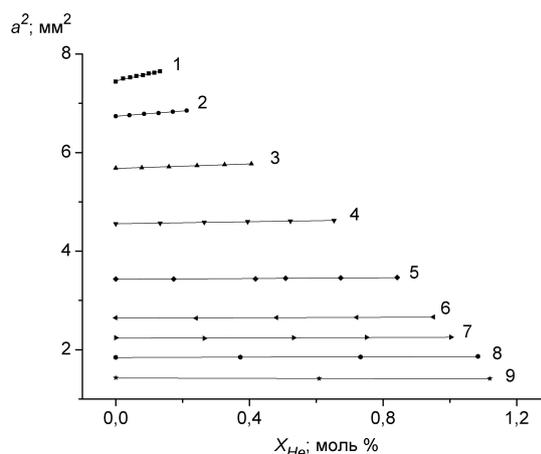


Рис. 1. Зависимость капиллярной постоянной раствора гелий-метан от концентрации по изотермам: 1 – $T = 95$ К; 2 – $T = 105$ К; 3 – $T = 120$ К; 4 – $T = 135$ К; 5 – $T = 150$ К; 6 – $T = 160$ К; 7 – $T = 165$ К; 8 – $T = 170$ К; 9 – $T = 175$ К.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДОВ СКОРОСТНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ПЕРЕГРЕТОЙ ЖИДКОСТИ

Гурашкин А.Л.* , Ямпольский А.Д.

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: nano-studio@yandex.ru

Исследование свойств перегретой жидкости представляет собой сложную экспериментальную задачу, обусловленную конечностью пребывания жидкости в этом метастабильном (перегретом) состоянии. Наиболее известные методы исследования перегретой жидкости, такие как пузырьковая камера и проволочный зонд [1], позволяют определить такие свойства, как время пребывания в метастабильном состоянии при заданных параметрах T и p и границу достижимого перегрева при постоянстве p . Появление новых методов скоростных исследований перегретых жидкостей дают новую информацию, полезную как для теоретических представлений о процессе – изучение распределения центров зародышеобразования с помощью скоростной видеосъемки [2], так и количественных измерений свойств – коэффициент преломления, плотность перегретой жидкости методом оптоволоконной денсиметрии [3]. Совместное применение методов скоростной видеосъемки и оптоволоконной денсиметрии дает новую информацию для качественного понимания процессов, происходящих при вскипании перегретой жидкости.

Собранная экспериментальная установка представляет собой пузырьковую камеру с оптоволоконным денсиметром, синхронизированную со скоростной видеокамерой. Чувствительной частью оптоволоконного денсиметра является скол оптоволоконного зонда с размером площадки около 0.01 мм. В опыте измеряется напряжение сигнала фотоприемника, пропорциональное величине отраженного излучения от свободного торца оптоволоконного зонда. Быстродействующая синхронизация измерений становится возможной благодаря резкому увеличению сигнала при появлении на торце оптоволоконного зонда пузырька паровой фазы с соответствующими размерами. При превышении установленного порога вырабатывается импульс управления для включения лазерного источника подсветки кадра киносъемки.

В результате проделанной работы получена осциллограмма зависимости сигнала оптоволоконного зонда от времени, совмещенная с видеорядом параллельной киносъемки. Для идентификации характера вскипания перегретой жидкости на изобарической кривой вскипания перегретого *n*-гексана сняты осциллограммы при атмосферном давлении и температурах 170.0, 176.0, 181.2, 181.8°С. Установлено, что вскипание перегретой жидкости (*n*-гексан) в стеклянных капиллярах (чистая пузырьковая камера) при атмосферном давлении сопровождается характерным импульсным сигналом. Из сходства полученных осциллограмм мы можем заключить, что наблюдаются общие признаки начала вскипания для указанных значений температуры перегретого *n*-гексана.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-00538а и № 10-08-00540а).

1. Ермаков Г.В., Термодинамические свойства и кинетика вскипания перегретых жидкостей, Екатеринбург: УрО РАН (2002)
2. Ermakov G.V., Gurashkin A.L., Lipnyagov E.V. and Perminov S.A., Technical Physics Letters, **35**, 1104 (2009)
3. Gurashkin A.L., Starostin A.A., Ermakov G.V. and Skripov P.V., J. Chem. Phys., **136** (2012)

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ВЯЗКОСТИ СУБСТРАТА, ПРИМЕНЯЕМОГО В ПРОИЗВОДСТВЕ БИОГАЗА

Караева Ю.В.*, Трахунова И.А.

Исследовательский центр проблем энергетики Федерального государственного бюджетного
учреждения Казанского научного центра РАН, г. Казань, Россия

*E-mail: julieenergy@list.ru

Для определения коэффициента динамической вязкости субстрата использовался ротационный вискозиметр RM 100, предназначенный для исследования реологического поведения жидкостей и измерения динамической вязкости (вязкость по Брукфильду). Прибор зарегистрирован в реестре СИ № 41593-09, разработан для решения всего спектра задач, связанных с контролем реологического поведения жидкостей, построения реологических кривых и проведения их анализа (фирма LAMY Rheology, Франция). Универсальный вариант вискозиметра, работающий в соответствии с требованиями стандартов ASTM/ISO 2555 (ГОСТ 25271), DIN/ISO 3219, ГОСТ 29226, ГОСТ 52249 (GMP). При проведении измерений использовалась измерительная система DIN/ISO 3219, состоящая из цилиндрического шпинделя МК DIN-1 и измерительного цилиндра DIN-1 с жидкостным термостатированием.

Проведено экспериментальное исследование динамической вязкости субстрата, применяемого в производстве биогаза, а именно, свиного навоза с содержанием сухого вещества от 6 % до 14 % в диапазоне температур от 100°C до 600°C и скорости сдвига 2.01 с⁻¹ до 304 с⁻¹.

В эксперименте использовался навоз, удаленный с пола животноводческого комплекса в зимнее время и разбавленный до целевой концентрации.

Зависимость динамической вязкости от скорости сдвига, температуры и концентрации можно представить в следующем виде:

$$\mu = k_0 \alpha^{a_2} \gamma^{a_1 \alpha + b_1} \exp(B/(RT)), \quad (1)$$

где k_0 , a_1 , a_2 , b_1 – реологические константы, B – энергия активации вязкого течения, R – универсальная газовая постоянная ($R = 8.314$ Дж/моль·К).

Пусть $k = k_0 \exp(B/RT_0)$, тогда получим:

$$\mu = k \alpha^{a_2} \gamma^{a_1 \alpha + b_1} \exp(B(T_0 - T)/(RT_0)), \quad (2)$$

где T_0 – температура ($T_0 = 293$ К), k – параметр, определяющий консистенцию субстрата при температуре T_0 .

В результате эксперимента были получены значения вязкости μ_{ijk} при различных значениях концентрации α_i , температуры T_j и скорости сдвига γ_k , где $i = 1, 2 \dots N$, $j = 1, 2 \dots M$, $k = 1, 2 \dots L$.

В результате получена следующая зависимость:

$$\mu = 5.4304 \cdot 10^{-5} \alpha^{6.0670} \gamma^{-0.0266\alpha - 0.6002} \exp(3.2918 \cdot 10^7 (T_0 - T)/(RT_0)).$$

Отклонение от экспериментальных данных было рассчитано по формуле:

$$\sqrt{\frac{1}{MNL} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^L \left| \frac{\mu_{ijk} - \mu(\alpha_i, T_j, \gamma_k)}{\max(\mu_{ijk})} \right|}. \quad (3)$$

Оно составило 0.023.

Результаты проведенного эксперимента позволяют утверждать, что при концентрации сухого вещества в растворе более 8 % субстрат является неньютоновской жидкостью.

ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ ОКСИ БЕРИЛЛИЯ В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР 20 – 1550°C

Козловский Ю.М.* , Яцук О.С., Станкус С.В.

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск, Россия

*E-mail: gamma@itp.nsc.ru

Благодаря своим уникальным свойствам окись бериллия BeO находит применение в различных областях науки и техники. Для многих целей требуются точные данные по тепловому расширению этого материала. Анализ существующих результатов показывает, что величина линейного коэффициента термического расширения (ЛКТР) в существенной степени зависит от технологии получения BeO, плотности и примесей, поэтому необходимо измерять ЛКТР тех марок BeO, которые непосредственно используются на практике. В нашей стране распространены изделия из окиси бериллия производства Ульяновского металлургического завода. Поэтому цель настоящей работы состояла в проведении измерений коэффициента термического расширения керамики на основе BeO, изготовленной на АО “УМЗ”, в широком интервале температур твердого состояния.

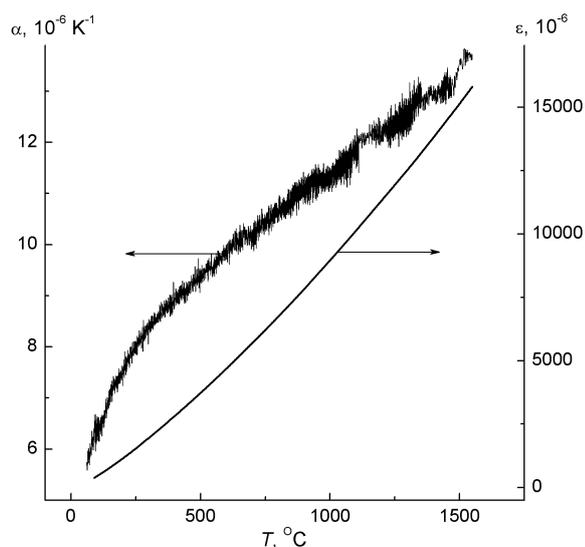


Рис. 1. Первичные данные по линейному коэффициенту термического расширения (α) и относительному удлинению (ϵ) окиси бериллия.

Тепловое расширение окиси бериллия исследовалось на dilatометре DIL-402C с держателем и толкателем из корунда в интервале температур 20 – 1550°C при нагреве-охлаждении печи со скоростью 2 К/мин в атмосфере аргона. Измерения проводились каждые 3 с, что обеспечивало шаг по температуре 0.1°C и позволяло получить более 15000 тысяч экспериментальных точек за один нагрев (охлаждение). Нулевой ход dilatометра определялся на стандартном образце корунда длиной 25 мм и диаметром 6 мм в условиях идентичных условиям основных экспериментов. На рисунке приведены типичные результаты измерений относительного удлинения (ϵ) и ЛКТР (α) окиси бериллия, полученные при нагреве образца. Обработка всех полученных данных позволила определить аппроксимационные зависимости ЛКТР и относительного удлинения от температуры, рассчитать справочные таблицы. Погрешность ЛКТР не превышает $(1.5 - 2) \times 10^{-7} \text{ K}^{-1}$. Проведено сопоставление с известными литературными данными.

Погрешность ЛКТР не превышает $(1.5 - 2) \times 10^{-7} \text{ K}^{-1}$. Проведено сопоставление с известными литературными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 2.

ТЕПЛОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

Кутергина Н.А.*, Кузьмин В.А.

ФГБОУ ВПО Вятский государственный университет, г. Киров, Россия

*E-mail: bagira_nat@pochta.ru

К высокоэнергетическим установкам относятся различного рода двигатели летательных аппаратов: жидкостные ракетные двигатели, воздушные ракетные двигатели, ракетные двигатели на твердом топливе (РДТТ), а также газотурбинные двигатели.

В работе проводились исследования теплового излучения продуктов сгорания для модельных РДТТ для условий камеры сгорания и среза сопла.

Схема камеры сгорания и среза сопла РДТТ представлена на рис. 1. Выделялся исследуемый объем (заштрихованные области на схеме) с указанной толщиной слоя при заданной температуре, в котором вычислялись радиационные характеристики и характеристики излучения.

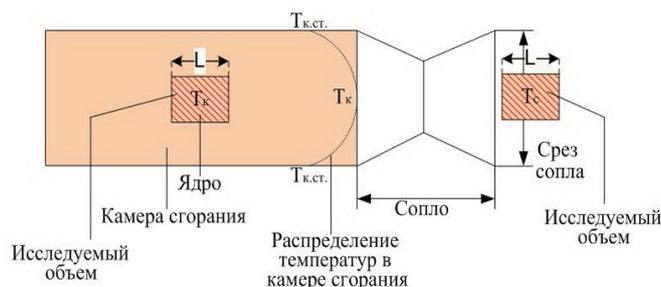


Рис. 1. Схема камеры сгорания и среза сопла РДТТ.

Цель данной работы – комплексное расчетное исследование радиационных характеристик (спектральные и интегральные сечения и коэффициенты поглощения, ослабления, рассеяния и индикатриса рассеяния) и характеристик излучения (спектральные и интегральные плотности потоков и степень черноты) полидисперсных систем частиц высокоэнергетических установок. Представление результатов комплексных расчетов в удобном для

интерпретации виде (в графической и табличной форме).

Для этого использовалась программа SPECTR, разработанная в ВятГУ, которая позволяет рассчитывать характеристики излучения дисперсных систем и гетерогенных продуктов сгорания, радиационные характеристики единичных частиц и радиационные характеристики единичного объема. Важнейший исходный параметр – комплексный показатель преломления $m = n_1 - n_2 \cdot i$, где n_1 – показатель преломления, n_2 – показатель поглощения частиц конденсированной фазы продуктов сгорания. Вторым важным исходным параметром является параметр дифракции $\rho = 2\pi r/\lambda$. В данной работе в качестве функции распределения частиц по размерам использовалось гамма-распределение. Также исходными данными являются термо- и газодинамические параметры (температура, давление, массовая доля, состав, концентрация и т.д.). Исходные данные для поставленных задач взяты в [1].

По результатам расчетов были построены графические зависимости характеристик излучения от длины волны, температуры, состава. Также были сделаны следующие выводы: по результатам исследований можно установить области наибольшего влияния определяющих параметров продуктов сгорания на характеристики излучения для их корректного учета или пренебрежения [2].

1. Кузьмин В.А., Тепловое излучение в двигателях и энергетических установках, Киров: ООО «Фирма «Полекс» (2004)
2. Кутергина Н.А., Исследование теплового излучения продуктов сгорания энергетических установок методом вычислительного эксперимента: Дисс. канд. техн. наук, Казань (2012)

ПРЕДЕЛЬНЫЕ РАСТЯЖЕНИЯ РАСТВОРОВ ЭТАН–МЕТАН

Панков А.С.

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: artem_pankov1987@mail.ru

Процессы, связанные с фазовым переходом жидкость–пар находят широкое применение в различных отраслях науки и техники. При определенных условиях такие процессы могут сопровождаться метастабильностью жидкой фазы.

Представленная работа посвящена экспериментальному исследованию кинетики спонтанного вскипания раствора этан–метан. Метан, этан – основные компоненты природного газа, что определяет ценность проведенного исследования для технических приложений. Опыты проводились методом непрерывного понижения давления на перегретый раствор. Экспериментальная установка и методика проведения опытов подробно описаны в [1].

В опытах измерены предельные растяжения перегретых растворов при двух значениях концентрации метана (2.1 и 6.0 моль %). Исследуемый раствор готовился непосредственно в измерительной ячейке. Содержание метана в жидком этане определялось по давлению насыщенных паров несколько раз в ходе эксперимента.

На рис. 1 сплошной линией изображено давление насыщения при концентрации метана 6.0 моль %, светлыми точками – полученные значения давления вскипания, черными точками – результаты опытов по измерению времени жизни [2]. Штриховой линией показан расчет по классической теории гомогенной нуклеации. Видно, что максимальные значения растяжений удовлетворительно согласуются как с данными [2], так и с теоретическими расчетами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты №10-08-96043-р_Урал_а, 12-08-31261-мол_а), Правительства Свердловской области и программы УрО РАН для молодых ученых и аспирантов (проект №11-2-НП-223).

1. Байдаков В.Г., Перегрев криогенных жидкостей, Екатеринбург: УрО РАН (1995)
2. Baidakov V.G., Kaverin A.M., Pankov A.S., Nucleation in Liquid Ethane with Small Additions of Methane, J. Phys. Chem., doi: 10.1021/jp306861h (2012)

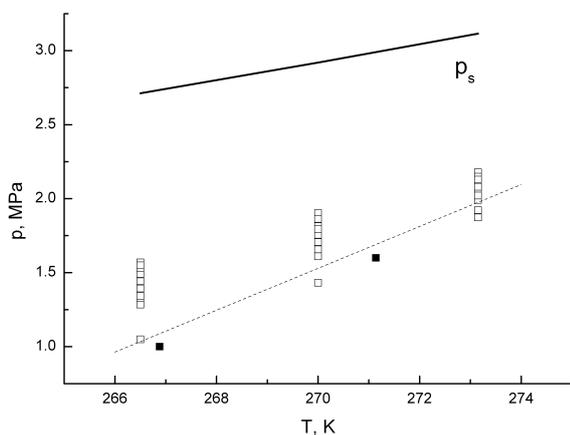


Рис. 1. Предельные растяжения растворов этан–метан.

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ И ТЕМПЕРАТУРОПРОВОДНОСТЬ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ In – Sn

Савченко И.В.*, Станкус С.В., Агажанов А.Ш.

ИТ СО РАН, г. Новосибирск, Россия

*E-mail: savchenko@itp.nsc.ru

Жидкие металлы и их сплавы широко используются в различных областях современной техники. В настоящее время теория еще не позволяет предсказывать теплопроводность металлических расплавов с требуемой для практики точностью, а экспериментальные данные малочисленны и отягощены значительными погрешностями. По этой причине получение новых достоверных экспериментальных данных по теплопроводности жидких металлов является актуальной задачей теплофизики.

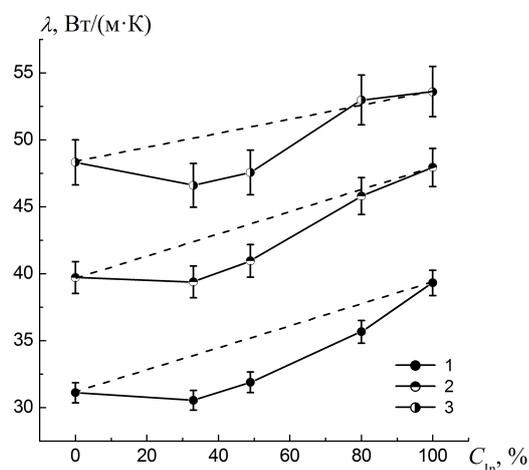


Рис. 1. Изотермы теплопроводности жидких сплавов системы индий-олово. C_{In} – массовая концентрация индия, 1 – 600 К, 2 – 900 К, 3 – 1200 К.

В настоящей работе методом лазерной вспышки измерены коэффициенты теплопроводности (λ) и температуропроводности (a) индия, олова и трех их бинарных сплавов (33 мас. %, 51 мас. % и 80 мас. % индия) в широком интервале температур жидкого состояния (от температуры плавления до 1200 К). Для измерений и приготовления сплавов использовались индий и олово чистотой 99.996 % и 99.999 % соответственно. Сплавы изготавливались путем расплавления в атмосфере аргона навесок чистых компонентов, взятых в требуемом соотношении, и последующего тщательного перемешивания расплава механической мешалкой. Эксперименты выполнены на установке LFA – 427 [1], используя уникальную методику, подробно описанную в [2]. Измеренные значения теплопроводности чистых компонентов, а также эвтектического сплава хорошо согласуются с наиболее надежными литературными данными. Литературных данных для сплавов иного состава найти не удалось.

Как видно из рисунка, для системы индий-олово при концентрации индия 50 ат. % и менее в пределах оцениваемых погрешностей теплопроводность сплавов не зависит от содержания компонентов и совпадает с λ жидкого олова. Дальнейшее увеличение концентрации индия уже приводит к росту теплопроводности сплава, причем измеренные значения хорошо согласуются с расчетом по правилам аддитивности. Аналогичная картина наблюдалась и для других исследованных нами сплавов легкоплавких металлов (индия, олова, свинца и висмута).

Работа выполнена при поддержке междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН №25.

- <http://www.ngb-ta.ru/ru/products/detail/pid,24.html>
- Станкус С.В., Савченко И.В., Методика измерения теплопроводности и температуропроводности металлических расплавов методом лазерной вспышки, Методика. ГСССД МЭ 202 – 2012, М.: Стандартинформ (2012)

ИМПУЛЬСНО-ПАЧЕЧНЫЙ МЕТОД НАГРЕВА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ

Смотрицкий А.А.^{1*}, Ямпольский А.Д.¹, Окуловский Ю.С.²

¹Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²ЦКО УРФУ, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: smotritskiy@bk.ru

Для обеспечения надежности работы оборудования и конструкций, вовлеченных в процессы переноса тепла, разрабатываются специальные технологические среды: смазочно-охлаждающие и закалочные жидкости, теплоносители, связующие, а также материалы тепловой защиты. Проблема обоснованного выбора технологических сред и рабочих тел термически напряженных процессов, а также оценки пределов «выживаемости» этих сред под действием мощного тепловыделения включает в себя ряд задач фундаментального и прикладного характера. Основой для решения этих задач служит знание теплофизических свойств веществ в широкой области изменения температуры и длительности воздействия, включая область термически неустойчивых состояний вещества.

Таким образом, сложилась мотивация для развития метода импульсного нагрева зонда [1], а также метода численного моделирования параметров теплообмена [2] на основе результатов опыта. Ключевое отличие данного подхода от традиционных экспериментальных методов заключается в управлении мощностью нагрева зонда на фоне изменения с температурой теплофизических свойств как зонда, так и вещества.

Для определения параметров теплообмена используются численные методы: нестационарное температурное поле рассчитывается методом конечных разностей. Для определения теплофизических свойств по данным импульсного опыта использована итерационная процедура, в основу работы которой положены генетические алгоритмы.

Приоритетным направлением для развития данного исследовательского направления является применение различных режимов импульсного нагрева зонда и сопоставление полученных результатов с монотонным нагревом при постоянной мощности тепловыделения. Для повышения информативности экспериментальной термограммы нами развиваются методы управляемого импульсного нагрева зонда, дающие возможность увеличить масштаб полезного сигнала, получаемого в опыте. Одним из режимов воздействия на вещество, представляющим практический интерес, является метод импульсно-пачечного нагрева. Чередование коротких (1 мс по порядку величины) мощных импульсов нагрева и коротких пауз между импульсами, как показал наш опыт [3], способствует повышению разрешающей способности опытных данных.

Работа выполнена при поддержке президиума УрО РАН (проект 11-2-НП-671) и фонда CRDF (проект RUE1-7033-EK-11).

1. Skripov P.V., Smotritskiy A.A., Starostin A.A., Shishkin A.V., Journal of Engineering Thermophysics, **16**(3), 155-163 (2007)
2. Smotritskiy A.A., Skripov P.V., Starostin A.A. et al., Journal of Engineering Thermophysics, **19**(3), 144-153 (2010)
3. http://thermosymposium.nist.gov/pdf/Abstract_1085.pdf

КОНЦЕНТРАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВОВ Cr – C ВБЛИЗИ ЭВТЕКТИЧЕСКОГО СОСТАВА

Стерхова И.В.*, Камаева Л.В.

Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия

*E-mail: irina.sterkhova@mail.ru

В настоящее время объемная аморфизация металлических расплавов, реализуемая в условиях закалки их жидкой фазы со скоростями $\sim 1 - 10^3$ К/с, является перспективным способом получения массивных материалов (более 1 мм) с высоким уровнем механических, магнитных и других свойств, обусловленных их аморфной структурой. При этом наибольшее внимание привлекают новые объемные аморфные сплавы на основе переходных металлов, для которых основной «фазой-стеклообразователем» является τ -фаза ($M_{23}C_6$). Однако присутствие в составе сплавов таких соединений оказывает неоднозначное влияние на склонность их расплавов к объемной аморфизации [1, 2]. В связи с чем остается открытым вопрос о влиянии стабильной кристаллической τ -фазы в структуре сплава на состояние его расплава, а также о влиянии присутствующих в жидкой фазе микрогруппировок атомов с ближним упорядочением по типу τ -фазы на ее склонность к аморфизации. Таким образом, представляет интерес исследование влияния фазы $M_{23}C_6$ на структуру и свойства расплавов при небольших перегревах над ликвидусом. Поскольку наиболее структурно-чувствительным свойством жидкости является вязкость, и фаза $M_{23}C_6$ является равновесной только для бинарной системы Cr – C, в настоящей работе было проведено исследование кинематической вязкости расплавов этой системы. Система Cr – C в области, богатой хромом, имеет простую диаграмму эвтектического типа. Карбид $M_{23}C_6$ образуется в этой системе по перитектической реакции при температуре 1612°C. Для этой системы характерны высокие температуры плавления, а используемые для исследования жидкого состояния методики не позволяют изучать расплавы этой системы в широком концентрационном интервале. Поэтому была выбрана узкая область концентраций вблизи эвтектики от 10 до 17 ат. %С.

Кинематическую вязкость (ν) измеряли методом затухающих крутильных колебаний корундового тигля с расплавом с двумя торцевыми поверхностями в режимах ступенчатого нагрева от температуры ликвидус до 1680°C и последующего охлаждения. Максимальная ошибка вязкости не превышала 3.5 %.

Анализ температурных зависимостей вязкости расплавов Cr – C в области от 10 до 17 ат. %С показал, что политермы в режимах первого нагрева и охлаждения, а также в режиме повторных измерений не имеют никаких особенностей и хорошо описываются экспоненциальной зависимостью аррениусовского типа. По представленным политермам второго нагрева были рассчитаны концентрационные зависимости ν при различных температурах. Полученные изотермы вязкости имеют немонотонный характер. Увеличение концентрации углерода в сплаве приводит к росту ν , однако в области от 13.5 до 15 ат. %С наблюдается отклонение от монотонного роста с минимумом вблизи 14.5 ат. %С. Минимум на концентрационных зависимостях вязкости, как правило, наблюдается для бинарных систем вблизи эвтектического состава и свидетельствует о квазиэвтектической структуре расплава [3]. Однако в нашем случае наблюдается смещение минимума на изотермах ν в заэвтектическую область.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 12-03-31798 мол_а.

1. Петржик М.И., Молоканов В.В., Известия РАН. Серия Физическая, **65**, 1384 (2001)
2. Pannambalam V., Poon S.J., J. Mater. Res., **19**, 1320 (2004)
3. Залкин В.М., Природа эвтектических сплавов и эффект контактного плавления, Металлургия (1987)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ НА ПЛОСКОЙ ГРАНИЦЕ
КРИСТАЛЛ-ЖИДКОСТЬ: КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Типеев А.О.

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: tipeeff@ya.ru

Методом разделяющих стенок (РС) [1, 2] рассчитана величина свободной энергии на плоской границе кристалл-жидкость γ_∞ при температуре тройной точки при трех ориентациях кристаллической фазы относительно жидкой.

Величина γ_∞ определяется как обратимая работа, необходимая для формирования единицы площади межфазной границы. Идея метода РС – пошаговое создание двухфазной системы жидкость-кристалл из однородных фаз путем внедрения внешних стенок и вычисление затраченной работы на каждом этапе.

Исследуемые равновесные двухфазные модели содержали от 150000 до 250000 леннард-джонсовских частиц с параметрами взаимодействия для аргона и радиусом обрезания потенциала 6.78 молекулярных диаметра.

Рассчитано значение γ_∞ при трех ориентациях кристалла [100], [110] и [111]. Определена анизотропия межфазной свободной энергии: $\gamma_\infty^{[100]} > \gamma_\infty^{[110]} > \gamma_\infty^{[111]}$.

Исследовано влияние формы потенциала разделяющих стенок на величину γ_∞ .

Вычисления велись на графических процессорах кластера “Уран” Института математики и механики УрО РАН (г. Екатеринбург) и в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН (г. Москва).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 12-08-00467), Программы Президиума РАН (проект 09-П-2-1008).

1. Broughton J.Q. and Gilmer G.H., J. Chem. Phys. **84**, 5759 (1986)
2. Davidchack R.L. and Laird B.B., J. Chem. Phys. **118**, 7651 (2003)

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ ПЕРЕГРЕТОГО ЛЕННАРД-ДЖОНСОВСКОГО КРИСТАЛЛА

Типеев А.О.

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: tipeeff@ya.ru

Методом молекулярной динамики исследован процесс плавления метастабильного (растянутого) кристалла при двух температурах в областях положительного и отрицательного давлений.

Исследуемые модели содержали от 2048 до 500000 леннард-джонсовских частиц с параметрами потенциала взаимодействия для аргона. Частицы находились в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Исходная конфигурация – идеальный кристалл с гранецентрированной кубической решеткой. Путем линейного увеличения размеров ячейки был получен набор растянутых кристаллов, время существования которых конечно и случайно.

Было смоделировано около 2000 независимых событий плавления. Момент начала фазового превращения фиксировался по резкому изменению температуры и давления системы. Построены гистограммы времен ожидания плавления, выявлен пуассоновский характер их распределения. Определено среднее время жизни метастабильного кристалла в 14 термодинамических состояниях. Рассчитана частота нуклеации и построена ее барическая зависимость в диапазоне давлений от –1470 до –1500 бар при $T = 48$ К и от 55 до 135 бар при $T = 102$ К.

Процесс плавления визуализирован.

Вычисления велись на графических процессорах кластера “Уран” Института математики и механики УрО РАН (г. Екатеринбург) и в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН (г. Москва).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 12-08-00467), Программы Президиума РАН (проект 09-П-2-1008).

АНАЛИТИЧЕСКИЕ ЗАВИСИМОСТИ ДЛЯ КАПИЛЛЯРНОЙ ПОСТОЯННОЙ И ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ РАСТВОРА ЭТАН–МЕТАН В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР И КОНЦЕНТРАЦИЙ

Хотиенкова М.Н.* , Андбаева В.Н.

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: mary-anton@bk.ru

В данной работе представлены результаты экспериментального исследования, и приведены аналитические зависимости капиллярной постоянной и поверхностного натяжения компонентов СПГ (раствора этан–метан) в широком интервале температур и концентраций. Помимо практической потребности, связанной с использованием данного раствора в криогенной технике, знание поверхностного натяжения необходимо для описания кавитационных явлений и кинетики нуклеации криогенных растворов.

Для определения поверхностного натяжения раствора этан–метан использовался дифференциальный вариант метода капиллярного поднятия. Опыты проводились по десяти изотермам в интервале температур (93.15 – 283.15) К при давлениях до 4 МПа.

Экспериментальные данные по капиллярной постоянной и поверхностному натяжению аппроксимированы аналитическими зависимостями:

$$a^2 = a_0^2 + B \cdot (p - p_0) + C \cdot (p - p_0)^2. \quad (1)$$

Здесь a_0^2 и p_0 – капиллярная постоянная и давление насыщения чистого этана. Коэффициенты B и C являются функциями температуры вида $d/(T - T_0)^n + \sum_{i=0}^5 b_i T^i$, где d , T_0 и n – константы, причем для коэффициентов B и C они различаются. На рис. 1 представлены относительные отклонения экспериментальных данных по капиллярной постоянной от рассчитанных по уравнению (1). Максимальные отклонения достигают 7 % на изотерме 173.15 К. Для поверхностного натяжения вид аппроксимационной зависимости аналогичен уравнению (1).

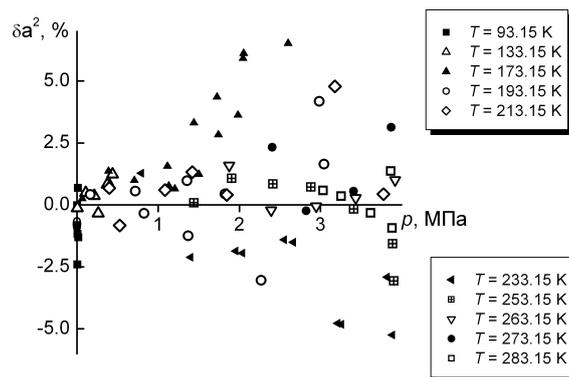


Рис. 1. Относительные отклонения значений капиллярной постоянной от уравнения (1) по изотермам.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-96043-р_урал_а, 12-08-31261-мол_а), программы УрО РАН для молодых ученых и аспирантов (проект № 11-2-НП-223) и Правительства Свердловской области.

ОСОБЕННОСТИ РАСШИФРОВКИ ДИЛАТОГРАММ

Цветкова К.Ю.^{1*}, Михайлов С.Б.¹, Михайлова Н.А.²¹Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия²УрГУПС, г. Екатеринбург, Россия*E-mail: cvetkovaky@mail.ru

Для получения более подробной информации о температурных интервалах протекания фазовых и структурных превращений в материалах предложено использовать кривые истинных значений температурного коэффициента линейного расширения (ТКЛР), получаемые при пересчете дилатограмм прямых измерений. В этом случае протекание превращений представляется в виде максимумов на общем фоне монотонного изменения кривой ТКЛР.

Для проведения фона монотонной кривой ТКЛР попытались разработать алгоритм на основе анализа информационных данных справочника под редакцией Б.Е. Неймарка. [1]. Получили, что для стали в отоженном состоянии уровень значений ТКЛР существенно зависит от типа кристаллической решетки матрицы. Подобная особенность навела на мысль, что кривые выделяемого фона ТКЛР отражают фундаментальные особенности взаимодействия атомов, которые присутствуют в составе стали в максимальном количестве. В данном случае это атомы железа. Вклад взаимодействий остальных атомов пропорционален их содержанию и, в основном, укладывается в разброс не более 10 %.

В соответствии с акустической моделью твердого тела фундаментальные особенности формирования ТКЛР описываются законом Дюлонга-Пти и законом Дебая (с учетом коэффициента Грюнайзена). Для выбора типа фоновой кривой было решено провести анализ результатов теплового расширения элементов периодической системы Д.И. Менделеева, приведенных в работе С.И. Новиковой [2].

В случае обработки кривых ТКЛР в рамках пакета Excel было решено, чисто **формально**, использовать тренд логарифмической зависимости. Для его построения достаточно взять как минимум две реперные точки. Первая точка – это нулевое значение ТКЛР для всех материалов при температуре абсолютного нуля. Ко второй точке можно отнести имеющиеся измеренные значения ТКЛР в районе комнатных температур при условии отсутствия в этом диапазоне фазовых превращений. В зависимости от значений ТКЛР для данного типа кристаллической решетки можно зафиксировать коэффициенты формулы тренда, с помощью которых восстанавливаем логарифмическую зависимость в соответствии с температурными точками экспериментальной кривой.

В результате наложения линии фона на экспериментальную кривую любое фазовое превращение проявляется в виде ярко выраженного максимума на фоновой кривой. Этот максимум можно интерпретировать «статической» и «динамической» компонентами кривой ТКЛР. Можно предположить, что статическая компонента имеет линейный вид и определяется процентным содержанием фаз в структуре стали. Динамическая компонента в этом случае имеет колоколообразный вид и отражает кинетические особенности протекания превращения и, в первую очередь, выделение тепловой энергии, выделяемой, либо поглощаемой микробоъемками материала в момент превращения.

Таким образом, предлагаемый алгоритм должен позволить однозначно выделять эффекты ТКЛР, отражающие фазовые превращения в сплаве.

1. Физические свойства сталей и сплавов, применяемых в энергетике, Справочник под ред. Неймарк Б.Е., М-Л «Энергия» (1967)
2. Новикова С.И., Тепловое расширение твердых тел, Изд-во «Наука» (1974)

Электрoфизика

Энeкшрoфизикe

~ o ~

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ИМПЕДАНСА И ЕГО КОМПОНЕНТ
АМОРФНЫХ МАГНИТОМЯГКИХ ЛЕНТ НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТА

Семиров А.В.¹, Деревянко М.С.^{1*}, Букреев Д.А.¹, Моисеев А.А.¹, Курляндская Г.В.²

¹)Восточно-Сибирская государственная академия образования, г. Иркутск, Россия

²)Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, ИЕН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: mr.derevyanko@gmail.com

Исследованы ленты составов $Fe_3Co_{64}Cr_3Si_{15}B_{15}$ и $Fe_3Co_{67}Cr_3Si_{15}B_{12}$, полученные методом быстрой закалки из расплава на вращающийся барабан. Длина лент составляла 50 мм, ширина – 2 мм, толщина – 20 мкм. Согласно данным рентгеновской дифракции, ленты находились в аморфном состоянии.

Исследования проводились в температурном диапазоне T от 170 до 400 К. Температуры ниже комнатной достигались помещением образца в поток паров азота. Для достижения температур выше комнатных использовался поток нагретого воздуха. Температура образца контролировалась термопарой.

Действительная R и мнимая X компоненты импеданса Z измерялись на автоматизированном измерительном комплексе магнитоимпедансной спектроскопии [1] при действующем значении пробного переменного тока 10 мА в диапазоне частот f от 0.1 до 70 МГц.

Из температурных зависимостей модуля импеданса была рассчитана его температурная чувствительность, приведенная к $Z(T_K)$:

$$S_Z = \frac{\partial Z}{\partial T} \cdot \frac{1}{Z(T_K)} \cdot 100\%, \quad (1)$$

где $Z(T_K)$ – импеданс при температуре Кюри.

Выявлено, что температурная чувствительность импеданса S_Z в области температуры Кюри максимальна и зависит от частоты переменного тока, протекающего по образцу. Так, максимальных значений величина S_Z лент обоих составов достигает на частотах переменного тока около 2 МГц. В случае лент сплава $Fe_3Co_{64}Cr_3Si_{15}B_{15}$ она составляет 8 %/К, а лент сплава $Fe_3Co_{67}Cr_3Si_{15}B_{12}$ – 9 %/К. Это на порядок превышает температурную чувствительность платиновых температурных сопротивлений.

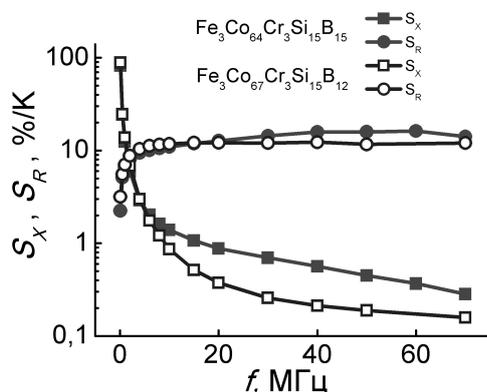


Рис. 1. Частотные зависимости температурной чувствительности компонент импеданса S_X и S_R .

Однако при использовании данных сплавов в магнитоимпедансных преобразователях можно добиться их большей температурной чувствительности путем детектирования не модуля импеданса, а его компонент. Из частотных зависимостей температурной чувствительности компонент импеданса S_X и S_R (рис. 1) видно, что наибольшую чувствительность имеет мнимая компонента импеданса и на частоте 100 кГц достигает 100 %/К для лент обоих составов. С ростом частоты происходит уменьшение чувствительности S_X . Температурная чувствительность действительной компоненты S_R с ростом частоты, наоборот, увеличивается и достигает максимального значения 10 %/К на частоте переменного тока около 6 МГц.

1. Семиров А.В., Моисеев А.А., Букреев Д.А. и др., Научное приборостроение, **20**, 2, 42-45 (2010)

ОСОБЕННОСТИ МЕТОДА ОДНООСНОГО МАГНИТНО-ИМПУЛЬСНОГО КОМПАКТИРОВАНИЯ ПОРОШКОВ

Заяц С.В.*

Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: seriyoga@iep.uran.ru

Плоский спиральный индуктор лежит в основе многочисленных магнитно-импульсных установок (МИУ). Такие установки используют энергию сильного импульсного магнитного поля для изготовления деталей криогенных сосудов, формовки деталей, сварки труб из разнородных материалов и их отбортовки, разрушения горных пород до класса крупности с учетом производственных задач и т.д. [1 – 3]. В Институте электрофизики МИУ используется в качестве одноосного динамического пресса усилием до 100 т для магнитно-импульсного прессования (МИП) микро- и нанопорошков различного состава и морфологии.

МИП порошков является динамическим методом компактирования наряду со взрывным прессованием, характеризуется кратковременным воздействием на порошок (сотни микросекунд) высоких давлений, свыше 1 ГПа. При этом давление к порошку в случае МИП прилагается плавным нарастанием без создания ударных волн в сжимаемом объеме, что позволяет получать плотные компакты на основе керамики без макродефектов. Плавное импульсное нагружение позволяет прикладывать давления на уровне пластичности материалов прессинструмента, что невозможно при статическом прессовании без разрушения или деформирования оснастки.

Установка МИП позволяет проводить горячую дегазацию порошков – нагрев до 500°C в вакууме с остаточным давлением до 10 Па. Данная процедура позволяет удалять из порошков адсорбированные газы и воду с поверхности частиц, что способствует получению беспористых компактов пластичных материалов, а для хрупких материалов, таких как керамики, упростить процесс спекания. Также возможность дегазации позволяет компактировать пиррофорные материалы, консервированные в инертных средах: аргоне и даже жидком гексане [4].

Для получения твердооксидных топливных элементов успешно применялось совместное МИП порошков и пленки, полученной методом шликерного литья. При этом не происходило отслоение пленки после прессования и спекания компактов. Также для создания электрических контакторов успешно прошло получение градиентных компактов на основе слоев серебра и Ag-SnO без их расслоения и какой-либо дополнительной механической или термической обработки.

Основной особенностью МИП является инерционность массивного стального концентратора, который разгоняется магнитным полем, создаваемым в индукторе. В зависимости от плотности и высоты засыпки порошка в пресс-форме можно создать такие условия, когда концентратор успеет набрать достаточно высокую скорость, чтобы после окончания импульса тока в индукторе продолжать свое движение и дополнительно уплотнить порошок. Сейчас также исследуется возможность использования более легкого концентратора из алюминиевого сплава, который разгоняется быстрее, но при этом обладает меньшей инерционностью и механической прочностью.

1. Миронов В.А., Работает магнитный импульс, Рига: Зинатне (1974)
2. Белый И.В., Фертик С.М., Хименко Л.Т., Справочник по магнитно-импульсной обработке металлов, Издательство при ХГУ (1977)
3. Барвинок В.А., Самохвалов В.П., Кирилин А.Н., Известия самарского научного центра РАН, **2**, 319-324 (1999)
4. Заяц С.В., Иванов В.В., Кайгородов А.С., Иванова О.Ф., Медведев А.И., Мурзакаев А.М., Химия в интересах устойчивого развития, **15**, 51-57 (2007)

ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ КОНСОЛИДАЦИИ ПОРОШКОВЫХ СРЕД

Кайгородов А.С.*

Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: kaigor@iep.uran.ru

В работе проводится обзор исследований в области консолидации порошковых материалов с применением электромагнитных полей. Потенциал традиционных термомеханических методов получения материалов существенно ограничен вследствие сложности регулирования состояния структуры в процессе обработки. Прецизионное управление состоянием материалов в процессе синтеза и консолидации порошков, например наноматериалов, может быть осуществлено с помощью применения импульсных электромагнитных полей, включая наиболее современные импульсные методы, к числу которых относят спарк-плазменное спекание, микроволновое спекание и высоковольтное импульсное компактирование. Особое внимание в настоящей работе уделяется магнитно-импульсной консолидации порошков, в частности физическим основам создания износостойких струе-формирующих сопел из оксидных наноструктурных керамик.

В отличие от традиционных подходов формования длинномерных цилиндров, например гидростатическим прессованием, развиваемый метод радиального магнитно-импульсного прессования (РМИП) благодаря высокой интенсивности эффективнее уплотняет нанопорошки керамик. Применение магнитно-импульсного прессования – как одноосного, так и радиального – для компактирования наноразмерных порошков было предложено и развито в пионерских работах [1, 2]. Метод позволяет уплотнять нанопорошки керамик до высокой относительной плотности, порядка 0.7. В результате импульсного прессования имеет место механическая активация нанопорошков, которая выражается в сильном искажении кристаллической решетки, генерации дефектов и полиморфных превращений в направлении увеличения доли более стабильных модификаций, в частности оксида алюминия.

В настоящей работе в качестве исходной порошковой среды использовалась смесь $Al_2O_3 + 15$ вес. % Al [3], отлитая в полимер-керамическую пленку. Для формирования трубчатых струе-формирующих сопел применялось РМИП с последующим традиционным контролируемым спеканием на воздухе.

Для синтеза керамики с заданными характеристиками исследованы режимы РМИП пленочных заготовок с варьированием материала разгонной оболочки (алюминий или медь) и энергетических характеристик процесса (магнитное поле 16 – 24 Тл, напряжение зарядной батареи 10 – 15 кВ). В результате оптимизации получены прессовки с плотностью до 2.4 г/см^3 , что позволило получить в результате спекания при $1550^\circ\text{C}/30$ минут прочную керамику с плотностью 3.6 г/см^3 (~ 0.9 от теоретически возможной).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 12-08-00976).

1. Иванов В.В., Паранин С.Н., Вихрев А.Н., Патент RU № 94039190/02 (1994)
2. Иванов В.В., Паранин С.Н. и др., Материаловедение, **5**, 49 (1997)
3. Иванов В.В., Кайгородов А.С. и др., Российские нанотехнологии, **1**, 201 (2006)

АВТОЭМИССИОННЫЕ СВОЙСТВА ИСКУССТВЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Комарский А.А.^{1,2*}, Чепусов А.С.^{1,2}, Кислов Е.А.¹, Кузнецов В.Л.¹

¹)Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²)Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: aakomarskiy@gmail.com

Автоэмиссионные катоды (АЭК) имеют ряд преимуществ перед термоэлектронными: отсутствие накала, высокая плотность тока эмиссии, безынерционность, близкая к экспоненциальной крутизна на начальном участке вольт-амперных характеристик (ВАХ). На роль автоэммиттеров хорошо подходят искусственные углеродные материалы (ИУМ) [1] благодаря их высокой температуре плавления и возможности стабильно работать в условиях технического вакуума.

Исследования автоэмиссионных свойств и долговременной стабильности эмиссии при разных давлениях Ar в межэлектродном промежутке проведены на установке для измерения ВАХ [2]. В работе исследованы ВАХ АЭК двух типов:

– образцы из монокристаллических углеродных материалов на основе коксопечковых композиций. Исследованы коксопечковые композиции с различной температурой синтеза 1300, 1700, 2100, 2700°C.

– промышленные образцы из поликристаллических углеродных материалов.

Для исследования промышленных образцов выбраны следующие марки графита: мелкозернистый графит (МГ), мелкозернистый прочный графит (МПП-7), изостатический графит (GS-1800), графит малозольный (ГМЗ), графит электродный (ГЭ).

Для всех образцов измерена напряженность электрического поля старта автоэлектронной эмиссии при давлении $2 \cdot 10^{-4}$ Па.

Исследовалась временная стабильность работы эмиттеров при различных токах эмиссии в диапазоне давлений от $2 \cdot 10^{-4}$ Па до $1 \cdot 10^{-2}$ Па.

Измерена зависимость внутреннего сопротивления измерительной ячейки с катодами из различных ИУМ от давления.

Методом РФЭС исследованы изменения электронной структуры валентной полосы, Оже-линий и сателлитной структуры основной линии углерода под действием автоэмиссионных процессов [3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 10-08-00830-а.

1. Шешин Е.П., Структура поверхности и автоэмиссионные свойства углеродных материалов, М.: Издательство МФТИ (2001)
2. Кислов Е.А., Кузнецов В.Л. и др., Альтернативная энергетика и экология, **3**, 40-43 (2010)
3. McFeely F.R. et al., Phys. Rev. B, **9**, 5268-5278 (1974)

Нелинейные волны на поверхности раздела жидких диэлектриков в сильном горизонтальном электрическом поле

Зубарев Н.М., Кочурин Е.А.*

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*E-mail: kochurine@el.ru

Внешнее горизонтальное электрическое поле оказывает стабилизирующее воздействие на свободную поверхность жидкого диэлектрика, а также на поверхность раздела диэлектрических жидкостей [1]. В работе [2] было обнаружено, что плоские нелинейные волны могут распространяться без дисперсии по свободной поверхности жидкости со значительной диэлектрической проницаемостью вдоль направления сильного внешнего поля.

В настоящей работе демонстрируется, что аналогичными свойствами обладают слабо-нелинейные волны на поверхности раздела двух жидкостей, отношение диэлектрических проницаемостей которых прямо пропорционально отношению их плотностей. Это означает, что нелинейные волны могут распространяться без искажений по направлению, или против направления внешнего горизонтального электрического поля. Как следствие, нелинейность необходимо учитывать только при анализе взаимодействия противоположно направленных волн. В рамках гамильтонового формализма нам удалось построить аналитическое решение уравнений движения, описывающее взаимодействие встречных слабо-нелинейных волн – см. рис. 1. Отметим, что в предельном случае малого отношения плотностей жидкостей возможно описание сильно-нелинейного взаимодействия волн

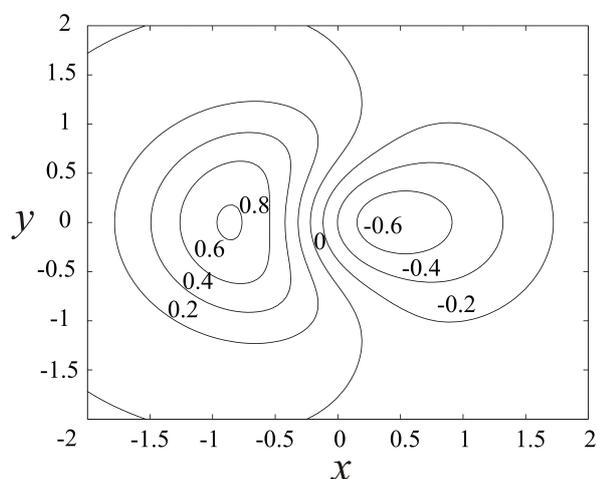


Рис. 1. Линии уровня (изолинии) поверхности, соответствующие взаимодействию двух пространственно локализованных волн; нелинейные эффекты приводят к нарушению симметрии относительно $x = 0$.

при помощи метода конформных отображений [3].

Работа выполнена при поддержке РФФИ-Урал (проект 10-08-96016) и Президиума УрО РАН в рамках программы Президиума РАН “Фундаментальные проблемы нелинейной динамики” (проект 12-П-2-1023) и программы поддержки молодых ученых и аспирантов (проект 11-2-НП-590).

1. Melcher J.R., Phys. Fluids **11**, 12 (1968)
2. Зубарев Н.М., Письма в ЖЭТФ **89**, 6, 317-321 (2009)
3. Zakharov V.E., Dyachenko A.I., Vasilyev O.A., European Journal of Mechanics B **21**, 283–291 (2002)

Наноматериалы Наномашинлар

~ o ~

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЕЧНОЙ СТАДИИ РОСТА GaAs НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ

Ambrosini S.F.^{1-5*}, Priante G.^{1,2}, Rubini S.²

¹Università degli Studi di Trieste, Италия

²TASC IOM CNR, Италия

³ELETTRA Sincrotrone Trieste, Италия

⁴Durham Science University, Durham, Великобритания

⁵Санкт-Петербургский Академический Университет, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: stefano.ambrosini@mail.ru

Стандартно нитевидные нанокристаллы (ННК) растут по механизму «пар-жидкость-кристалл» с использованием золота Au в качестве катализатора [1]. Однако Au нельзя применять в устройствах на базе кремния [2]. Рост ННК из GaAs может происходить с использованием в качестве катализатора Ga (самокаталитический рост). Но в этом случае наблюдается нежелательный, так называемый, «reservoir effect», приводящий к размытию гетеропереходов [3].

В данной работе было проведено исследование зависимости морфологии и кристаллической структуры GaAs ННК от отношения потоков прекурсоров [4]. Также было показано, что рост исследованных ННК может продолжаться и после пассивации капли катализатора. Результаты исследований процесса бескаталитического роста GaAs ННК, проведенных другими исследовательскими группами, имеют противоречивый характер [5, 6]. Мы провели детальное исследование роста ННК и показали, что если рост ННК продолжать после пассивации капли при отношении потоков m менее 5, то капля образуется вновь (см. Рисунок 1). Этот результат является неожиданным и, насколько нам известно, ранее не регистрировался.

Таким образом, мы показали, что контроль над кристаллической структурой и, как следствие, уровнем легирования ННК можно осуществлять за счет изменения потока Ga. В последующем мы планируем установить и исследовать механизмы контроля над процессом бескаталитического роста ННК.

1. Wagner R.S. and Ellis W.C., Appl. Phys. Lett., **89** (1964)
2. Perea D.E. et al., Nano Lett, **6** (2006)
3. Tang E. et al., NT, **50** (2011)
4. Ambrosini S. et al., AIP ADVANCES, **1** (2011)
5. Rudolph D. et al., NL, **11**, (2011)
6. Dimakis E. et al., Cryst. Growth and Des., **11** (2011)

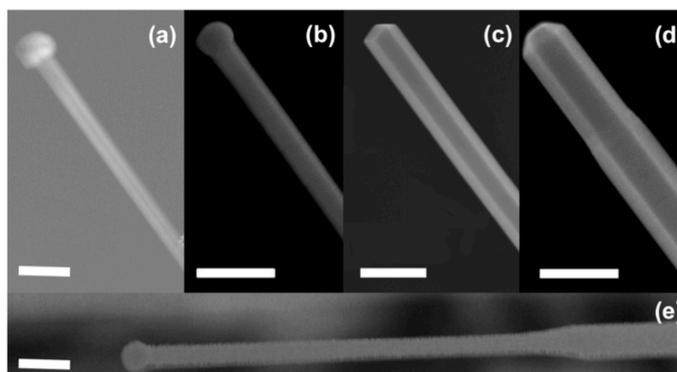


Рис. 1. Нитевидные нанокристаллы, выращенные в ходе экспериментов при аналогичных условиях: (a) отношение потоков прекурсоров $m < 5$ – радиус ННК растет от основания к вершине; (b) $m = 5$ – радиальное уширение отсутствует; (c) $m > 10$ – радиальное уширение отсутствует, капля отсутствует, наблюдается фасетирование верхней грани ННК; (d) продолжение эксперимента (b) после 5 минут под потоком As; (e) продолжение эксперимента (d) – капля катализатора образуется вновь, диаметр ННК уменьшается. Деление шкалы – 200 нм.

НЕОДНОРОДНОСТИ В СИСТЕМЕ Fe/Fe_xTiSe₂Анохин А.А.^{1*}, Шкварина Е.Г.², Шарафутдинов М.Р.³, Упоров С.А.⁴, Титов А.Н.¹¹Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия³Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, г. Новосибирск, Россия⁴Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*E-mail: thermoshock@mail.ru

Неустойчивость однофазного состояния интеркалатных соединений дихалькогенидов титана с переходными металлами делает эти материалы перспективными прекурсорами для получения магнито-резистивных композитов. Для получения практически важных свойств требуется, чтобы при распаде однородного материала возникали кластеры магнитного металла. При этом во всех экспериментальных работах [1, 2] наблюдалось выделение кластеров халькогенидов интеркалированного металла. В работе [3] сделано предположение, что это является следствием взаимодействия металлических кластеров с паром халькогена. Следовательно, наблюдаемая картина является динамической. Для изучения кинетики её формирования мы исследовали фазовый состав Fe_{0.5}TiSe₂ методами время-разрешающей дифракции и магнетометрии.

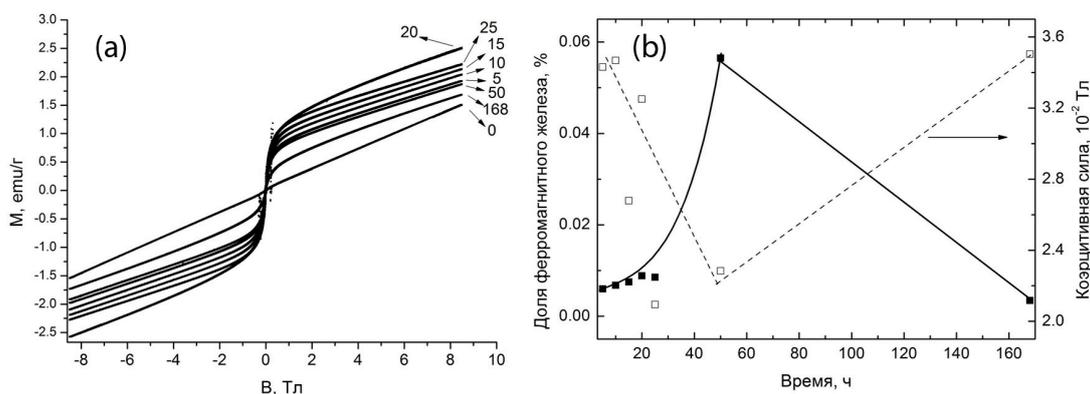


Рис. 1. (a) полевые зависимости намагниченности образцов после отжига при 500°C, время отжига в часах показано рядом с каждой кривой; (b) временные зависимости концентрации выделившегося железа (сплошная линия) и коэрцитивной силы железных включений (пунктир).

Обнаружено, что на первоначальных этапах отжига в основном происходит выделение металлического железа. При больших временах отжига наблюдается его переход в селенид железа. Характерные времена процесса составляют порядка нескольких часов.

1. Sherokalova E.M., Pleschov V.G., Baranov N.V., Korolev A.V., Phys. Lett. A, **369**, 236 (2007)
2. Селезнёва Н.В., «Особенности кристаллической структуры и фазовые превращения в дихалькогенидах титана, интеркалированных атомами 3d-металлов», Диссертация к.ф.-м.н., УрГУ, Екатеринбург (2011)
3. Калихман В.Л., Уманский Я.С., УФН, **108**, 503 (1972)

САМООРГАНИЗУЮЩИЕСЯ СТРУКТУРЫ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ
ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Ашиккалиева К.Х.*, Каньгина О.Н.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург, Россия

*E-mail: kuralai1986@mail.ru

Монокристаллический кремний (МК) – востребованный и наиболее изученный полупроводниковый материал современной микроэлектроники. В настоящее время в связи со стремительной миниатюризацией элементов микро- и оптоэлектроники усилия исследователей направлены на разработку новых способов формирования микро- и наноструктур кремния для возможности создания на их основе перспективных устройств микро- и оптоэлектроники, фотовольтаики. Одним из способов структурирования МК является метод лазерного облучения, основанный на самоорганизации поверхности кремния и возникновении спонтанно упорядоченных структур [1, 2]. Самоформирующиеся под действием лазерного облучения кремниевые микро- и наноструктуры не получили пока должного применения, поскольку не до конца изучены условия их возникновения. В связи с этим актуальны исследования, которые направлены на изучение особенностей взаимодействия лазерного излучения с поверхностью кремния и условий самопроизвольного возникновения упорядоченных структур.

Цель настоящей работы – выявить спонтанно упорядоченные модификации поверхности монокристаллического кремния при импульсном лазерном воздействии.

Монокристаллический полупроводниковый кремний ориентации (111) облучали импульсным излучением твердотельного лазера. Количество импульсов варьировали от 1000 до 7000. Облучение проводили на воздухе при нормальных условиях. После облучения образцы исследовали методами оптической и атомно-силовой микроскопии.

Выявлено, что лазерная обработка в 1000, 3000 импульсов вызывает генерацию дислокаций, образование окисной пленки, оплавление поверхностных слоев кремния. При числе импульсов 5500 в расплаве кремния обнаружены упорядоченные пирамидальные структуры (ПС). Выявлена эволюция данных структур в интервале 5500 – 7000 лазерных импульсов: с увеличением количества импульсов происходит разрастание скоплений ПС. Проведена количественная оценка площади скоплений ПС, их размеров и плотности (количество ПС, приходящихся на единицу площади). Показано, что лазерной обработка при 6500 импульсов является оптимальной, поскольку при данном режиме ПС более однородны по размерам и форме и практически полностью заполняют поверхность зоны облучения.

Таким образом, обнаружены самоорганизующиеся структуры на поверхности расплава МК под действием лазерного излучения. Выявлено, что формирующиеся структуры чувствительны к параметрам лазерной обработки. Разработанный метод при подборе конкретных экспериментальных условий может быть использован для структурирования кремниевых подложек в микроэлектронике, фотовольтаике.

1. Фам Куанг Тунг, Метод формирования регулярной матрицы нанокластеров кремния в системе кремний-диоксид кремния для элементов и устройств вычислительной техники: автореф. дис. канд. тех. наук, С-Пб. (2009)
2. Хайдуков Е.В., Храмова О.Д., Рочева В.В. и др., Известия высших учебных заведений. Приборостроение, **54**, 26-32 (2011)

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА АДГЕЗИЮ НА ГРАНИЦАХ РАЗДЕЛА МЕЖДУ ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ И ДИОКСИДОМ ЦИРКОНИЯ

Бакулин А.В.*, Кулькова С.Е.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

*E-mail: bakulin@ispms.tsc.ru

Явления на границах раздела достаточно интенсивно исследуются теоретическими методами в последнее десятилетие, поскольку понимание механизмов связи в металлокерамических системах является важным как с фундаментальной, так и практической точки зрения. Функциональные свойства коррозионноустойчивых покрытий, высокотемпературных композитов, электронных материалов существенно зависят от адгезии на металлокерамических границах раздела [1, 2]. Слоистые композитные материалы на основе магнитных металлических фольг и изолирующих оксидных слоев используют, например, при производстве моторов, генераторов и трансформаторов [3].

Расчеты атомной и электронной структуры идеальных и дефектных границ раздела между ZrO_2 и ОЦК (Mo, Ta, W, Nb), ГЦК (Cu, Ni, Pd, Pt, Rh) металлами проводились с использованием методов псевдопотенциала и проекционных присоединенных волн, реализованных программным кодом VASP [4].

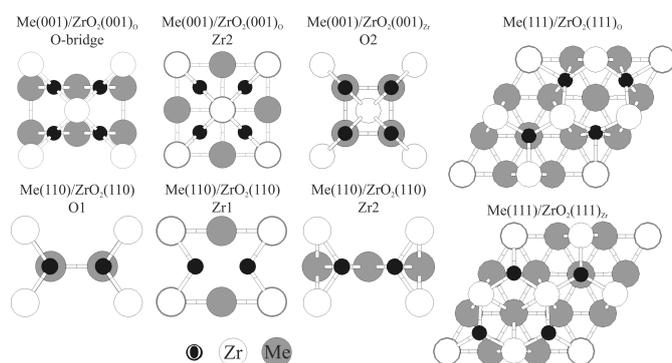


Рис. 1. Атомные структуры рассмотренных границ раздела Me/ ZrO_2 .

Установлены общие тенденции изменения работы отрыва в зависимости от структуры и состава интерфейсных слоев (рисунок 1), электронной структуры металлов и наличия дефектов. Показано, что сильная адгезия достигается на границах раздела с ОЦК металлами на кислородном окончании полярной поверхности $ZrO_2(001)$. Высокие значения адгезии пленок ОЦК металлов по сравнению с ГЦК металлами связаны с большим зарядовым переносом от металла к подложке, что приводит к увеличению вклада ионной составляющей в механизм химической связи на границах раздела. Показано,

что в диоксиде циркония, стабилизированном легирующими добавками оксидов CaO, MgO, Y_2O_3 , уменьшается критическое влияние кислородных вакансий в интерфейсных слоях на адгезию, поскольку примеси замещения существенно влияют на положения соседних атомов подложки и способствуют восстановлению межатомных интерфейсных связей. На циркониевом интерфейсе влияние кислородных вакансий на адгезию выражено в меньшей степени, тогда как уменьшение гибридизации орбиталей контактирующих атомов вследствие появления примесей замещения существенней отражается на энергии отрыва пленок от оксидной подложки.

1. Finnis M.W., J. Phys: Condens. Matter. **8**, 5811 (1996)
2. Mucoz M.C., Gallego S. et al., Surf. Sci. Rep. **61**, 303 (2006)
3. Moorhead A.J., Kim H.E., J. Am. Ceram. Soc. **82**, 1349 (1999)
4. Kresse G., Hafner J., Phys. Rev. B **47**, 558 (1993)

МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СВЕРХРЕШЕТОК НА ОСНОВЕ МЕДИ $[FM/Cu]_n$ С РАЗЛИЧНЫМ МАТЕРИАЛОМ ФЕРРОМАГНИТНЫХ СЛОЕВ

Банникова Н.С.*, Миляев М.А., Наумова Л.И., Проглядо В.В., Каменский И.Ю.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Сверхрешетки представляют собой систему чередующихся нанослоев, напыленных на подложку: ферромагнитные слои разделены немагнитными прослойками. При воздействии магнитного поля в таких системах наблюдается гигантский магниторезистивный эффект (ГМР). Такие искусственно синтезированные материалы используются для создания различных датчиков, например магнитного поля, которые отличаются малыми геометрическими размерами, большим сигналом, хорошей температурной стабильностью и относительно малой ценой.

В настоящей работе для поиска наилучших функциональных характеристик (максимального магнитосопротивления при минимальном поле насыщения) была синтезирована серия образцов наноструктур с различным типом ферромагнитных слоев и медью в качестве немагнитной прослойки $[FM/Cu]_n$, где FM – Co, $Co_{90}Fe_{10}$, $Ni_{80}Fe_{20}$, $Ni_{76}Fe_{10}Co_{14}$. При комнатной температуре методом магнетронного напыления на постоянном токе в установке MPS-4000-S6 приготовлены образцы, проведены исследования их структурных свойств, намагниченности и магнитосопротивления (МС).

Величина МС в многослойных наногетероструктурах изменяется осциллирующим образом в зависимости от толщины немагнитной прослойки [1]. В нашей работе для сверхрешеток с оптимизированной толщиной меди, соответствующей первому максимуму ($t_{Cu} = 9 - 10 \text{ \AA}$), наибольшее значение магнитосопротивления (37 %) при величине поля магнитного насыщения (H_S) около 10 кЭ получено для системы Co/Cu. Малое значение МС (5.5 %) при $H_S = 1 \text{ кЭ}$ обнаружено у сверхрешеток $Ni_{80}Fe_{20}/Cu$. Для системы CoFe/Cu значение магнитосопротивления составляет 26.5 %, поле магнитного насыщения равно 15 кЭ. Гистерезис для выше перечисленных сверхрешеток пренебрежимо мал.

Среди сверхрешеток с толщиной меди 22 – 23 \AA наибольшим значением МС выделяются сверхрешетки Co/Cu (29 %), в тоже время обладая сравнительно большими значениями магнитного гистерезиса и H_S . Многослойные системы с ферромагнитными $Co_{90}Fe_{10}$ и $Ni_{76}Fe_{10}Co_{14}$ характеризуются меньшими величинами МС, но и более слабыми полями насыщения (около 100 Э). В результате, для обеих систем достигается высокая чувствительность около 0.35 %/Э, определенная из полевой зависимости МС.

В данной работе впервые синтезированы сверхрешетки $(Ni_{80}Fe_{20})_{60}Cr_{40}/[Co_{90}Fe_{10}/Cu]_n$ и показано, что использование сплава пермаллой-хром в качестве буферного слоя позволило понизить гистерезис с 20 Э (по результатам работы [2]) до 10 Э, сохранив при этом величину магнитосопротивления.

Таким образом, изменяя в небольших пределах толщину меди в многослойной системе, выбирая материал буферного слоя, ферромагнитных слоев и количество пар слоев можно в широких пределах изменять основные физические характеристики сверхрешеток, добиваясь высокой магниторезистивной чувствительности.

Работа выполнена в рамках темы «Спин» при частичной поддержке РФФИ № 10-02-00590, ОФИ УрО РАН № 12-2-024-НПО и 12-2-2-009-АРКТИКА, а также НШ.6172.2012.2.

1. Parkin S.S.P., Li Z.G., Smith D.J., Appl. Phys. Lett., **58**, 23, 2710–2712 (1991)
2. Миляев М.А., Наумова Л.И., Проглядо В.В., Криницина Т.П., Бурханов А.М., Банникова Н.С., Устинов В.В., ФММ, **112**, 2, 146–154 (2011)

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ И РЕЖИМОВ ДИФФУЗИОННОГО ОТЖИГА НА СТРУКТУРУ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СЛОЕВ В КОМПОЗИТАХ НА ОСНОВЕ Nb₃Sn

Валова-Захаревская Е.Г.*, Попова Е.Н., Дерягина И.Л.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Сверхпроводящие композиты Nb/Cu – Sn на основе соединения Nb₃Sn разрабатываются во ВНИИНМ им. ак. Бочвара (г. Москва) и применяются для создания высоких полей в термоядерных реакторах [1]. При «бронзовом» методе получения таких проводников Nb-волокна вводят в матрицу из сплава Cu – Sn, проводят многократное волочение и сборку, и получают проволоку $\varnothing \sim 1$ мм, содержащую тысячи Nb-волокон в бронзовой матрице. Затем идет отжиг, в процессе которого олово из матрицы поступает в Nb-волокна, где образуются сплошные слои сверхпроводящей фазы Nb₃Sn, структура, состав и морфология которой оказывают определяющее влияние на токонесущую способность этих проводников. Слои фазы Nb₃Sn обладают нанокристаллической структурой, от совершенства которой зависят сверхпроводящие характеристики. Для стабилизации нанокристаллической структуры применяют двухступенчатый диффузионный отжиг [2], а для повышения токонесущей способности – легирование титаном [3, 4].

В настоящей работе методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии исследованы структура и морфология слоев фазы Nb₃Sn в проводниках, отличающихся концентрацией Ti, способом легирования и режимами диффузионного отжига. Изучен вопрос о возможности уменьшения времени отжига на первой и второй ступенях и о его влиянии на структуру сверхпроводящих слоев и степень проработки Nb-волокон. Показано, что зарождение слоев Nb₃Sn начинается с образования наноразмерных зародышей этой фазы в Nb-волокнах, а толщина слоев растет с повышением концентрации Ti в волокнах, а также при легировании титаном бронзовой матрицы.

Зависимость толщины слоев фазы Nb₃Sn от способа легирования композита и концентрации Ti наиболее заметна после первой ступени отжига. При искусственном легировании Nb-волокон увеличение концентрации Ti ведет к укрупнению зерен и увеличению ширины зоны столбчатых зерен. Вторая ступень диффузионного отжига приводит к укрупнению зерен Nb₃Sn, сформированных на первой ступени, и к более глубокому проращению слоя сверхпроводящей фазы в остаточный Nb. При более длительном диффузионном отжиге (575°C/150 ч + 650°C/200 ч) достигается незначительно более глубокая проработка Nb-волокон по сравнению с укороченным отжигом, но при этом возможно увеличение размеров зерен фазы Nb₃Sn и разброса по размерам, особенно при повышенном содержании Ti в Nb-волокнах.

Композиты с легированной бронзовой матрицей при всех проведенных режимах диффузионного отжига имеют наиболее благоприятную структуру и морфологию с точки зрения достижения максимальной токонесущей способности проводника, а именно, более широкую зону мелких равноосных зерен Nb₃Sn с малым разбросом по размерам и минимальную ширину зоны столбчатых зерен.

1. Pansyrny V., Shikov A., Vorobieva A., *Cryogenics*, **48**, 354 (2008)
2. Попова Е.Н., Родионова Л.А., Попов В.В. и др., *Материаловедение*, **3**, 14 (2005)
3. Попова Е.Н., Сударева С.В., Дерягина И.Л. и др., *Материаловедение*, **10**, 52 (2009)
4. Дерягина И.Л., Попова Е.Н., Захаревская Е.Г. и др., *Журнал СФУ. Физика и математика*, **4(2)**, 149 (2011)

СИНТЕЗ ПОРИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ С ЗАДАННОЙ МОРФОЛОГИЕЙ
ПОВЕРХНОСТИ МЕТОДОМ АНОДИРОВАНИЯИльин Д.О.* , Дорошева И.Б., Вохминцев А.С.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: nytroman@gmail.com

К настоящему времени разработан ряд эффективных методов создания двух- и трехмерных наноструктур, в их числе методы, основанные на принципе самоформирования [1]. Они включают агрегацию наночастиц в структуры с заданной формой и размером. Одним из таких материалов является пористый оксид алюминия, который служит матрицей при формировании катодолюминесцентных экранов высокого разрешения для визуализации радиационных полей. Известно, что размеры пор таких наноструктур зависят от условий синтеза: электролита, значений напряжения и тока при анодировании и др. В этой связи цель работы состояла в исследовании зависимости размера пор от напряжения анодирования пористого Al_2O_3 на примере щавелевой кислоты.

Сначала были получены 3 образца в электрохимической ячейке с раствором электролита $(COOH)_2$ 40 г/л при постоянном напряжении $U = 30, 45$ и 60 В и комнатной температуре. Анодирование проводилось в течение 30 минут. Затем на образцы напылялся слой золота толщиной 5 нм для исследования их поверхности в сканирующем электронном микроскопе Sigma VP компании Carl Zeiss.

Далее для статистической обработки данных использовалось программное обеспечение Клинкер С7 для графического анализа изображений компании SIAMS. Выполнена оценка средних значений диаметров пор d для полученных образцов пористого Al_2O_3 и построена зависимость $d(U)$. Показано, что размер пор изменяется от 17 до 33 нм при увеличении напряжения анодирования.

Таким образом, в ходе работы получены образцы пористого оксида алюминия при варьировании напряжения анодирования. Выполнено исследование морфологии поверхности образцов методом электронной микроскопии с последующим анализом изображения в программной среде. Анализ полученных данных показал, что средний диаметр пор $d = 17 - 33$ нм линейно зависит от напряжения анодирования в исследуемом диапазоне напряжений $U = 30 - 60$ В для электролита на основе $(COOH)_2$ 40 г/л. Данный результат сходится с теорией и более ранними работами [2].

1. Maria R.L., Yuri G., MRS communications, **2**, 51-54 (2012)
2. Белов А.Н., Гаврилов С.А., Шевяков В.И., Российские нанотехнологии, **1-2**, 223-227 (2006)

О РОЛИ АМОРФНОЙ ФАЗЫ В ПРОЦЕССАХ МЕХАНОСИНТЕЗА СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Fe₇₅C₂₅, ЛЕГИРОВАННЫХ O, N

Елькин И.А.* , Волков В.А., Чулкина А.А., Елсуков Е.П.

Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия

*E-mail: Ivan.A.Elkin@gmail.com

Несмотря на то, что механическое сплавление (МС) сплавов на основе системы Fe–C изучается продолжительное время, механизмы образования фаз все еще недостаточно ясны. В настоящей работе исследовались закономерности процессов фазообразования при МС в сплаве состава Fe_{72.6}C_{24.5}O_{1.1}N_{1.8}. Исследование проводили методами XRD, мёссбауэровской спектроскопии, измерения динамической магнитной восприимчивости. Изменение фазового состава сплава в процессе МС приведено на рисунке 1.

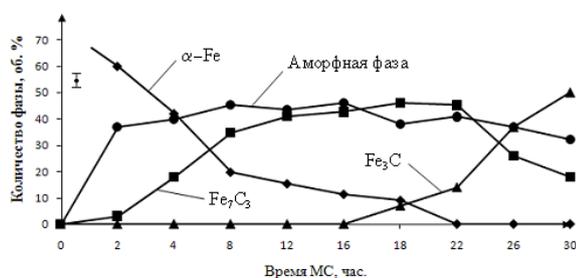


Рис. 1. Результаты количественного фазового анализа сплава Fe_{72.6}C_{24.5}O_{1.1}N_{1.8} после различных времен МС.

На основе полученных данных был проведен расчет концентрации углерода в аморфной фазе, результаты которого показывают, что соответствующий сорт карбида начинает образовываться при приближении состава аморфной фазы к его составу.

Изменения фазового состава МС образцов после низкотемпературных отжигов соответствуют изменениям состава аморфной фазы и коррелируют с изменениями фазового состава на рисунке 1.

Анализ полученных данных показывает, что в процессе МС аморфная фаза выступает не просто в качестве промежуточного звена в последовательности реакций механосплавления, но действует как активная среда и устойчивость остальных фаз определяется условиями динамического равновесия данной фазы с аморфной.

Работа выполнена при финансовой поддержке Проекта УрО РАН 12-У-2-1035.

ИК-ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ С ПРИМЕСЯМИ
РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВКарзанова М.В.^{1*}, Демидов Е.С.¹, Чигиринский Ю.И.², Европейцев Е.А.¹¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Н. Новгород, Россия²Научно-исследовательский физико-технический институт Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, г. Н. Новгород, Россия*E-mail: cherrymary08@mail.ru

Была исследована возможность сконцентрировать в тонкоплёночной структуре полезные свойства эффективных для фотолюминесценции (ФЛ) ионов эрбия Er^{3+} матричных материалов вольфрам-теллуридного стекла (ВТС) и многоканальную передачу $n\text{Si} \rightarrow \text{Er}^{3+}$, $n\text{Si} \rightarrow \text{Yb}^{3+} \rightarrow \text{Er}^{3+}$ [1]. Использовался монокристаллический кремний с ориентацией (100) марок КДБ 0.3 и КЭС 0.01. Слои пористого кремния (ПК) толщиной 1 мкм с пористостью 50% формировались анодным растворением кремния при плотности тока 10 mA/cm^2 в электролите 30% HF : 20% H_2O : 50% $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Часть образцов подвергалась окислительному отжигу на воздухе при температуре 1000°C . Слои ВТС на поверхности кремния и ПК толщиной 1 мкм получались высокочастотным магнетронным распылением в вакууме пресованной мишени из порошка ВТС. Для заполнения вольфрам-теллуридным стеклом пор ПК образцы подвергались вакуумному отжигу в течение 30 мин при температуре 500°C , при которой стекло размягчается до жидкого состояния. Сравнительно низкая температура сплавления ВТС выбрана, чтобы предотвратить исчезновения наночастиц кремния в ПК вследствие окисления этих наночастиц Si переносом кислорода от оксидов ВТС к кремнию. С этой же целью в экспериментах использовался частично окисленный при 1000°C ПК. Предполагалось, что образовавшийся при 1000°C слой оксида кремния предотвратит дальнейшее окисление наночастиц при сплавлении ВТС. Для полного окисления компонентов ВТС образцы выдерживались 30 мин в кислороде при температуре 500°C . Наилучшие результаты по квантовому выходу ФЛ ионов Er^{3+} и Yb^{3+} были получены для КДБ-0.3 со слоем ПК, предварительного окисленного перед напылением плёнок ВТС. Также исследовалась возможность усиления ФЛ на 1.5 мкм за счёт предварительной термообработки образцов ПК. Использовались подложки КДБ-0.3, на которых формировались слои ПК, как описано ранее. Затем подложки КДБ-0.3 со слоями ПК подвергались окислительному отжигу на воздухе при различных температурах 500, 700, 800 и 900°C в течение 30 мин, далее на них наносились плёнки ВТС. Наиболее эффективной для усиления ФЛ на 1.53 мкм оказалась температура предварительного отжига 700°C , при более высоких температурах наблюдается гашение ФЛ. Это можно объяснить увеличением доли диоксида кремния в слое ПК с увеличением температуры. Часть нанокристаллов при этом исчезает, в следствие чего снижается роль ПК в накачке ионов Er^{3+} . При этом ухудшаются свойства и ВТС как матричного материала, что подтверждается измерениями ФЛ с возбуждением на $\lambda = 980 \text{ nm}$, так как в данном случае не возбуждаются нанокристаллы в ПК. С увеличением температуры увеличивается интенсивность ФЛ от $n\text{-Si}$. В структуре с предварительным отжигом 900°C интенсивность ФЛ возросла в 16 раз.

Таким образом, показано, что присутствие частично пропитанного ВТС слоя ПК на кремнии позволяет на порядок увеличить квантовый выход ФЛ эрбия (1530 нм) при длинноволновом возбуждении, почти в 50 раз усилить ФЛ иттербия (980 нм) и в 25 раз усилить ФЛ эрбия при коротковолновой накачке. А также показана возможность усиления фотолюминесценции при комнатной температуре в таких структурах за счёт предварительного окислительного отжига ПК в диапазоне температур от 500 до 900°C .

1. Демидов Е.С. и др., ФТТ, **53**, 2294 (2011)

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО СПЛАВА НИТИНОЛ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Коротин Д.М.^{1*}, Бартковски С.², Курмаев Э.З.¹, Нойманн М.², Гундеров Д.В.³,
Валиев Р.З.³, Чолах С.О.⁴

¹Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²Физический факультет, Университет города Оснабрюк, г. Оснабрюк, Германия

³Институт физики перспективных материалов УГАТУ, г. Уфа, Россия

²Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: danila.korotin@gmail.com

Стехиометрический сплав никеля и титана ($\text{Ni}_{50.2}\text{Ti}_{49.8}$) используется для изготовления имплантируемых и вводимых в организм человека медицинских устройств (проволочные манипуляторы, катетеры, иглы, стенты [1]) благодаря уникальным механическим свойствам сплава, а так же его превосходной биосовместимости.

В данной работе представлены результаты измерений рентгеновских фотоэмиссионных спектров крупнозернистых (*cg*-NiTi) и наноструктурированных (*ns*-NiTi) имплантов из сплава нитинол до и после химического травления. Наноструктурированный нитинол получен методом интенсивной пластической деформации (ИПД) [2] и имеет лучшие механические свойства по сравнению с крупнозернистым NiTi. Крупнозернистые и наноструктурированные образцы нитинола были обработаны в 40 % растворе плавиковой кислоты (HF) в течение 1 минуты. По результатам анализа рентгеновских фотоэмиссионных спектров основного Ti 2*p* уровня нитинола (Рис. 1 левая панель) найдено, что поверхность химически необработанных образцов покрыта аморфным слоем диоксида титана TiO_2 . Этот слой обеспечивает биосовместимость имплантов, а также препятствует выходу на поверхность токсичного никеля. Согласно нашим исследованиям, химическая обработка образцов нитинола в плавиковой кислоте уменьшает толщину защитного слоя диоксида титана и увеличивает выход никеля на поверхность, увеличивая тем самым токсичность имплантов. Так же были обнаружены следы мышьяка (Рис. 1 правая панель) на поверхности химически обработанных имплантов, которые связаны с содержанием мышьяка в плавиковой кислоте [3].

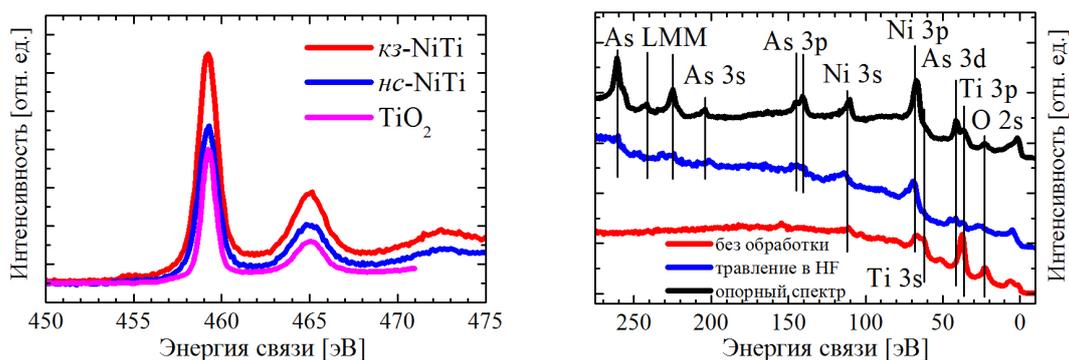


Рис. 1. РФЭС основного Ti 2*p* уровня NiTi (левая панель), РФЭС в энергетическом интервале 0 – 275 эВ NiTi (правая панель).

1. Korotin D.M. et al., JBMR, Applied biomaterials, **100B** (7), 1812–1816 (2012)

2. Valiev R.Z., Nature Mater., **3**, 511 (2004)

3. Fernández-Olmo et al., Separation and Purification Technology, **56**, 118–125 (2007)

ОСОБЕННОСТИ СИНТЕЗА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК МЕТОДОМ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ПИРОЛИЗА ЭТАНОЛА

Кравец Н.А.* , Косых А.С., Чайкин Д.В., Вохминцев А.С.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: kravec.nikita@mail.ru

Углеродные нанотрубки (УНТ) на данный момент являются одним из немногих наноматериалов, нашедших свое применение в широком спектре прикладных областей, таких как электронная техника, создание отдельных сверхпрочных элементов (например зондов для микроскопии) и получение композитов. Наиболее перспективным и экономически выгодным методом получения УНТ в больших количествах является метод каталитического пиролиза, основанный на разложении газообразного источника углерода на катализаторе. Известно, что указанным методом получают одно- и многостенные УНТ, нановолокна и другие виды наноструктур. В этой связи цель настоящей работы заключалась в исследовании влияния температуры синтеза УНТ методом каталитического пиролиза этанола на их диаметр.

Нанотрубки выращивались на установке CVDomna, предназначенной для получения различных видов углеродных наноструктур методом каталитического пиролиза углеродсодержащей парогазовой смеси на подложках и сложных структурах. В исследовании использовался катализатор дихлорид гексаамминникеля $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$, приготовленный золь-гель методом. На пластину кремния, служащую подложкой, наносился гель $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ в этаноле, и проводился технологический процесс. Температура выращивания варьировалась в диапазоне $T = 550 - 650^\circ\text{C}$, давление парогазовой смеси $P = 10 - 15$ кПа, объем аммиака $V_{\text{NH}_3} = 0.5 - 1$ мл и объем дихлорида никеля в этаноле $V_{\text{NiCl}_2} = 0.5 - 1.0$ мл. По окончании процесса синтеза на подложке получался черный нагар виде тонкой пленки.

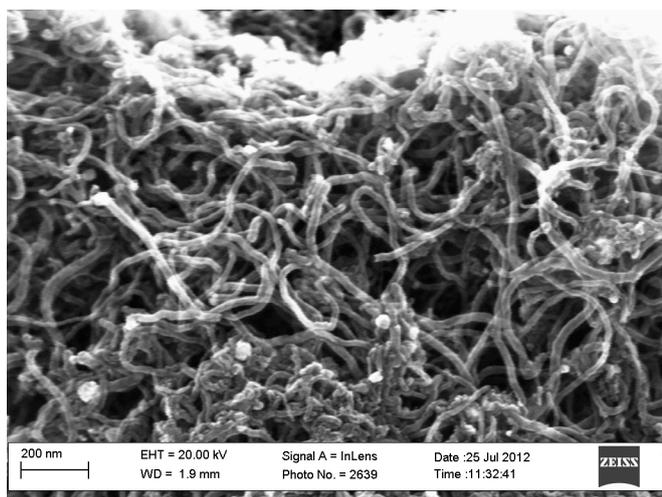


Рис. 1. РЭМ снимок УНТ, синтезированных при: $T = 650^\circ\text{C}$, $P = 15$ кПа, $V_{\text{NH}_3} = 0.5$ мл и $V_{\text{NiCl}_2} = 1$ мл.

Полученные образцы исследованы на растровом электронном микроскопе Sigma VP компании Carl Zeiss в режиме высокого вакуума. В качестве примера на рис. 1 представлен РЭМ снимок одного из них. Видно, что в синтезированном образце наблюдается большое количество многостенных УНТ с частицами катализатора в виде светлых пятен на их конце. Трубки не прямые, с очень большим количеством «загибов», длиной более 300 нм. Среднее значение диаметра составляет ≈ 28 нм.

По результатам проведенных исследований сделан вывод, что УНТ синтезируются в виде тонких пленок нагара, имеющих дендритную структуру во всем диапазоне $T = 550 - 650^\circ\text{C}$. При этом средний диаметр УНТ увеличился от 23 нм до 28 нм с ростом температуры синтеза в исследуемом диапазоне. Для получения чистых УНТ в виде отдельных трубок необходимо разбивать полученные образцы и очищать их от частиц катализатора.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В ИЗОМЕРАХ ФУЛЛЕРЕНА C₈₀

Лобанов Б.В.* , Мурзашев А.И.

Марийский государственный университет, г. Йошкар-Ола, Россия

*E-mail: lbv_marsu@mail.ru

Известно [1], что в фуллеренах углерод находится в sp^2 -гибридизированном состоянии. Три гибридные орбитали формируют остов структуры, и их состояния образуют полностью заполненные глубоколежащие зоны. Негибридная p -орбиталь представляет собой делокализованное состояние с одним электроном. Состояния этих орбиталей частично заполнены и образуют блуждающие π -связи. Именно π -электроны дают основной вклад в электронные свойства описываемых систем. В [2] было показано, что π -электронную подсистему фуллеренов необходимо описывать с помощью модели Хаббарда.

В данной работе в рамках модели Хаббарда вычислен энергетический спектр семи изомеров фуллерена C₈₀, подчиняющихся правилу изолированных пентагонов: №1 (D_{5d}), №2 (D_2), №3 (C_{2v}), №4 (D_3), №5 (C_{2v}), №6 (D_{5h}) и №7 (I_h). На основании полученных спектров были найдены спектры оптического поглощения чистых фуллеренов. Поскольку изомер №7 (I_h) не встречается в чистом виде [3], был получен спектр поглощения эндоэдрального соединения типа Ca@C₈₀ (рис. 1), который неплохо согласуется с экспериментальными данными [4].

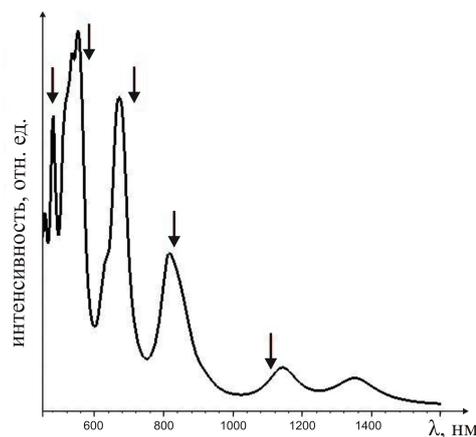


Рис. 1. Спектр оптического поглощения фуллерена Ca@C₈₀; стрелками отмечены экспериментально наблюдаемые пики поглощения.

1. Сидоров Л.Н., Юровская М.А. и др., Фуллерены, ЭКЗАМЕН, Москва (2005)
2. Миронов Г.И., Мурзашев А.И., ФТТ, **53**, 2273 (2011)
3. Коваленко В.И., Мухаметшафикова Л.Р., Структура и динамика молекулярных систем, Яльчик–2002, **1**, 249 (2002)
4. John T., Dennis S., Shinohara H., Appl. Phys. A, **66**, 243-247 (1998)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ ПОРОШКОВ СПЛАВА Fe – Si – Nb – Cu – В, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ДЕЗИНТЕГРАТОРНОГО РАЗМОЛА НА ИХ СВЧ-СВОЙСТВА

Мазеева А.К., Рамалданова А.А., Геращенко Е.Ю., Кузнецов П.А.

ФГУП «ЦНИИ КМ «Прометей», г. Санкт-Петербург, Россия

E-mail: victorm@crism.ru

Одной из актуальных задач современной техники является создание высокоэффективных систем электромагнитной защиты технических средств и биологических объектов в широком диапазоне частот. Традиционно для систем электромагнитного экранирования в СВЧ-диапазоне применяются различные ферриты, сендасты, специальные стали, карбонильное железо, однако каждый отдельно взятый материал работает в своём, относительно узком, диапазоне частот [1]. В настоящее время существует тенденция к расширению диапазона рабочих частот СВЧ-устройств, что требует применения новых, более современных магнитомягких материалов с более высокими магнитными характеристиками.

Перспективными материалами в данной области являются аморфные и нанокристаллические сплавы на основе железа. Они обладают аномально высокими магнитомягкими свойствами за счёт особой доменной структуры и появления межфазных обменных магнитных взаимодействий при нанокристаллизации. Исходные аморфные и нанокристаллические сплавы системы Fe–Si–Nb–Cu–В изготавливаются в виде лент, из которых далее измельчением получают порошок требуемой фракции.

В ЦНИИ КМ «Прометей» разработана технология ударно-дезинтеграторно-активаторной (УДА) обработки [2], позволяющая получать порошки из материалов практически любой твёрдости, сохраняя при этом первоначальную структуру материала, что очень важно в случае метастабильных аморфных и нанокристаллических материалов.

В данной работе исследовались порошки системы Fe–Si–В–Nb–Cu, полученные методом УДА-обработки исходной ленты. Затем производился отжиг порошка и его рассев на различные фракции. Предварительно были проведены исследования по выбору оптимального состава сплава данной системы и подобраны оптимальные режимы получения порошков. В данной работе исследовалось содержание нанокристаллической фазы и средний размер выделившихся кристаллитов в полученных порошках. Производилась оценка их влияния, а также влияние фракции порошков на магнитомягкие свойства материала. Таким образом, были установлены режимы получения нанокристаллического порошка, формирующие оптимальную структуру и свойства материала для работы в СВЧ-диапазоне.

1. Богуш А.В., Борботько Т.В., Гусинский А.В. и др., Электромагнитные излучения. Методы и средства защиты, Мн.: Бестпринт (2003)
2. Кузнецов П.А., Создание эффективных систем электромагнитной защиты на основе магнитомягких аморфных и нанокристаллических сплавов Со и Fe, автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата технических наук, СПб (2005)

ФИЛЬТРАЦИОННОЕ ГОРЕНИЕ ПРЕССОВАННОГО НАНОПОРОШКА АЛЮМИНИЯ В ВОЗДУХЕ

Мостовщиков А.В.

Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

E-mail: pasembellum@mail.ru

В настоящее время нитрид алюминия является одним из базовых материалов в производстве подложек для микроэлектроники. Вместе с тем, так как нитрид алюминия (как и многие нитриды–полупроводники типа $A^{III}B^V$) не образует жидкой фазы при атмосферном давлении, то существующие технологические методы получения нитрида алюминия являются относительно сложными и дорогостоящими.

Одним из способов решения проблемы получения нитридов является использование явления связывания азота воздуха и образования нитридов при горении нанопорошков (НП) в воздухе [1].

В условиях горения нанопорошка алюминия (НП Al) при свободном доступе воздуха в качестве конечных продуктов образуется нитрид алюминия в виде самостоятельной кристаллической фазы. При этом содержание нитридов может составлять от 30 до 90 мас. %. Процесс горения навески НП Al компактированного цилиндра (образца-таблетки) протекает в две стадии: первая стадия характеризуется невысокими температурами, обусловленными выгоранием абсорбированного наночастицами водорода, вторая стадия представляет собой режим теплового взрыва. Тепловой взрыв представляет собой процесс резкого повышения температуры образца от 800 до 2400°С за 5 – 10 с, причем он не сопровождается разлетом горящего образца (продуктов горения) и формированием высокоинтенсивного газового потока. При горении НП Al (в течение второй стадии) происходит формирование нитрида алюминия в виде нитевидных кристаллов [2].

Исследование продуктов сгорания нанопорошка алюминия с использованием рентгенофазового анализа позволяет сделать вывод, что в процессе горения прессованного нанопорошка алюминия основной сформировавшейся кристаллической фазой является фаза нитрида алюминия. Результаты фазового анализа поверхности горящего образца-таблетки «in situ» с помощью синхротронного излучения позволяют установить, что в процессе горения основными фазами, представленными на поверхности, являются фазы оксида и оксинитрида алюминия [3].

Таким образом, одним из возможных объяснений механизма образования нитрида алюминия при горении прессованного нанопорошка алюминия является диффузионный эффект, проявляющийся в том, что поверхность горящего нанопорошка образует полупроницаемую мембрану, связывающую на поверхности кислород воздуха. При этом азот воздуха беспрепятственно проникает внутрь образца-таблетки в зону высоких температур и там, непосредственно во фронте высокотемпературной волны горения, вступает в реакцию с нагретыми до высоких температур (~ 2400° С) наночастицами алюминия. В тоже время на поверхности сгоревшего образца присутствуют кристаллические фазы нитрида алюминия, образование и стабилизацию которых нельзя объяснить только в рамках гипотезы о фильтрационном горении.

1. Ильин А.П., Громов А.А., Горение алюминия и бора в сверхтонком состоянии, Изд-во Том. ун-та (2002)
2. Ильин А.П., Толбанова Л.О., Мостовщиков А.В., Известия Томского политехнического университета, **313/3**, 19 (2008)
3. Ильин А.П., Тимченко Н.А., Мостовщиков А.В., Роот Л.О., Звягинцева Е.С., Галимов Р.М., Известия вузов. Физика, **11/3**, 307 (2011)

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМЫ Li – Si

Попов З.И.^{1,2*}, Елисеева Н.С.²¹Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева,
г. Красноярск, Россия²Институт физики СО РАН им. Л.В. Киренского, г. Красноярск, Россия

*E-mail: zipcool@bk.ru

Материалы на основе кремния сейчас широко изучаются как аноды для следующего поколения литий-ионных аккумуляторов. Теоретическое исследование систем состава Si – Li проводили при помощи программ для квантово-химических расчетов VASP 5.2 в рамках теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении. Атомы лития помещали в тетраэдрические поры кристаллической структуры кремния [1]. В работе рассматривали зависимость величины барьера перескока атома лития между порами от концентрации лития в ячейке. Полные энергии систем, а также энергии перескока в них лития приведены в таблице 1.

Таблица 1. Влияние концентрации лития на высоту барьера перескока

Соединение	Е, эВ/атом Si	Высота барьера, эВ
Si ₆₄ Li ₁	-6.10	0.37
Si ₈ Li ₁	-5.87	0.61
Si ₄ Li ₁	-5.67	0.85

Обнаружено, что при расчете структуры с концентрацией лития с кремнием в соотношении 1:1 каркас из кремния сохраняет свою первоначальную структуру, однако при удалении одного лития и релаксации системы кристаллическая структура кремния разрушается с образованием аморфной смеси. Далее в суперъячейке из 216 атомов кремния и 2 литиев было исследовано влияние расстояния между атомами лития на высоту барьера перескока, см. таблицу 2.

Таблица 2. Влияние расстояния между атомами лития на полную энергию системы

Расстояние между Li, Å	Полная энергия, эВ	Энергия связи, эВ
2.5	-1221.83	-8.14
5	-1222.01	-8.32
9	-1222.05	-8.35

Из таблицы видно, что при увеличении расстояния между атомами лития полная энергия системы уменьшается. Это можно объяснить наличием частичного положительного заряда на атомах лития, что также подтверждается увеличением барьера перескока лития в занятую пустоту в направлении от соседнего лития с 0.73 эВ при расстоянии 2.5 ангстрем до 0.81 эВ при расстоянии 5 ангстрем между атомами лития.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №12-02-00640-а.

1. Попов З.И. и др., Журнал структурной химии, **52**, 891 (2011)

УМЕНЬШЕНИЕ ГИСТЕРЕЗИСА МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ СПИНОВЫХ КЛАПАНОВ MnIr/CoFe/Cu/[CoFe/NiFe] ПРИ ОТЖИГЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Рябова Т.А.* , Миляев М.А., Наумова Л.И., Проглядо В.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

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

Металлические наноструктуры типа «спиновый клапан» состоят из двух ферромагнитных слоев, разделенных немагнитной прослойкой, вектор намагниченности одного ферромагнитного слоя «закреплен» с помощью антиферромагнетика. Такие структуры используются, например, в качестве магнитных датчиков для считывания информации в жестких дисках.

Методом магнетронного напыления на постоянном токе в магнитном поле 110 Э были приготовлены спиновые клапаны с нижним расположением антиферромагнетика *стекло*/NiFeCr(30Å)/NiFe(20Å)/MnIr(*t*, Å)/CoFe(25Å)/Cu(20Å)/[CoFe(20Å)/NiFe(30Å)]/Ta(20Å) с буферным слоем [Ni₈₀Fe₂₀]₆₀Cr₄₀, выбранным согласно работе [1], композитным свободным слоем Co₉₀Fe₁₀/Ni₈₀Fe₂₀ и толщинами антиферромагнетика Mn₇₅Ir₂₅ *t* = 75Å и *t* = 100Å. Образцы обладали максимальной величиной магнитосопротивления (МС) – 9.2 % и 8.7 % соответственно. Ширина петли гистерезиса при перемагничивании «свободного слоя» для спинового клапана с толщиной антиферромагнетика 75 Å составляла 19 Э, а для спинового клапана с толщиной антиферромагнетика 100 Å – 21 Э. Отжиг в магнитном поле позволяет добиться уменьшения гистерезиса свободного слоя и увеличения магниторезистивного эффекта [2].

В данной работе отжиг проводился в вакууме при давлении 10⁻⁵ Па, магнитное поле с напряженностью 1.5 кЭ было приложено вдоль оси, однонаправленной анизотропии образца, сформированной при напылении. Образцы отжигались при температурах 250°C и 270°C в течение 30 минут. У образца с толщиной MnIr *t* = 75 Å в случае двух разных режимов отжига (при температуре 250°C и 270°C) гистерезис уменьшился до 11.8 Э и до 12.3 Э соответственно. При этом величина МС практически не изменилась. У образца с толщиной MnIr *t* = 100 Å после отжига при температуре 250°C МС уменьшилось до 7.6 %, а гистерезис свободного слоя – до 4 Э, и соответствующие величины уменьшились до 8.1 % и 5 Э при отжиге с температурой в 270°C.

Уменьшение времени отжига при температуре 270°C до 15 минут позволяет достигнуть тех же значений гистерезиса и МС, поэтому такой режим был выбран для отжига спинового клапана, имеющего толщину антиферромагнетика 100 Å, при условии, что образец был повернут внутри печи так, что отклонение оси легкого намагничивания от направления внешнего магнитного поля составляло 10 градусов. При отжиге в данной конфигурации достигнуто уменьшение гистерезиса свободного слоя до 5.5 Э при увеличении максимального значения МС до 9 %. При этом форма кривой магнитосопротивления стала более прямоугольной, что говорит о повышении магниторезистивной чувствительности пленки.

Таким образом, в результате проведенных исследований были найдены оптимальные режимы отжига, позволяющие улучшить характеристики рассмотренных структур, а именно уменьшить гистерезис свободного слоя спиновых клапанов в 4 раза.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ № 10-02-00590, Программы Президиума УрО РАН, проект № 12-2-2-009-АРКТИКА и № 12-2-024-НПО, ИШ.6172.2012.2.

1. Freitas P.P., Ferreira R., Cardoso S., Cardoso E., J. Phys.: Condens. Matter., **19**, 165221 (2007)
2. Liu Y.F., Cai J.W., Lai W.Y., Yu G.H., J. Appl. Phys., **103**, 093908 (2008)

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СВЕРХРЕШЕТОК Fe/Cr/Gd

Рябухина М.В.*, Наумова Л.И., Благодатков Д.В., Кравцов Е.А.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: marina-r-0308@mail.ru

Металлические многослойные наноструктуры («сверхрешетки») представляют большой интерес с точки зрения фундаментальной физики и технологических приложений. Сверхрешетки – искусственные структуры, состоящие из чередующихся ферромагнитных и неферромагнитных слоев, толщины которых составляют единицы нанометров.

Наиболее существенные эффекты, наблюдаемые в этих наносистемах, – это эффект гигантского магнетосопротивления и осциллирующее межслойное взаимодействие. На данный момент сравнительно хорошо изучено обменное взаимодействие в системах на основе $3d$ металлов. Межслойное обменное взаимодействие $3d$ и $4f$ магнитных металлов через немагнитную прослойку остается малоизученным [1, 2].

В настоящем докладе мы представляем результаты исследования структуры и магнитных свойств сверхрешеток Fe/Cr/Gd, где обменное взаимодействие между Fe и Gd осуществляется через прослойку Cr.

Серия сверхрешеток $[\text{Fe}(50\text{Å})/\text{Cr}(t)/\text{Gd}(35\text{Å})]_{12}$, где $t = 4.4 \div 60\text{Å}$, была выращена методом магнетронного распыления на подложках Si (100). Исследование магнитных свойств сверхрешеток проводилось с помощью SQUID магнетометра.

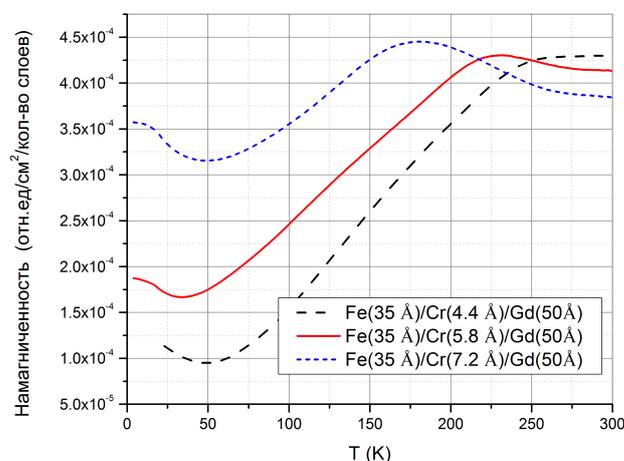


Рис. 1. Температурная зависимость намагниченности, измеренная при $H = 500$ Э.

На рис. 1 представлены характерные температурные зависимости намагниченности, измеренные во внешнем магнитном поле 500 Э. Результаты анализа говорят о том, что в полученных системах наблюдается новая особенность – температурный максимум намагниченности в системах со сравнительно толстыми слоями Cr. Предполагается, что можно управлять взаимной ориентацией магнитных моментов $3d$ и $4f$ металлических слоев, изменяя температуру.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ Урал № 10-02-96033.

1. Stromberg F, Antoniak C., vonHorste U., Keune W., J. Phys. D: Appl. Phys., **44**, 265004 (2011)
2. Dubiel S.M., Cieřlack J., Europhys. Lett., **53**, 383 (2001)

ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ ОТ СТАБИЛИЗАЦИИ И ИСХОДНОГО ФАЗОВОГО СОСТАВА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Семенова Ю.Н.*, Бабушкин А.Н.

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: ulia.shumina@k96.ru

В связи с развитием нанотехнологий в последние годы интенсивно исследуются материалы на основе диоксида циркония. Фазовые переходы и примесная стабилизация диоксида циркония являются предметом многих экспериментальных и теоретических исследований. Соединения на его основе используют для получения конструкционных (например, лопатки турбин) и функциональных материалов (в качестве упрочняющего компонента в медицинских имплантационных материалах). Существенное значение в такой керамике и композиционных материалах имеет соотношение тетрагональной и моноклинной фаз диоксида циркония, которое может меняться не только от количества введенной добавки, но и от температурного и барического воздействия на материал.

Трёхкомпонентные порошки, содержащие оксиды циркония, иттрия и алюминия образуют твёрдые растворы при температурах 600 – 1200°C, что позволяет получить керамику с высокими механическими свойствами. Изучение электрических свойств таких материалов при высоких давлениях может дать полезную информацию об их структуре и фазовых переходах.

Высокое давление создавали в камере типа «закруглённый конус – плоскость». Для нагружения камеры высокого давления (КВД) использовали низкотемпературный пресс. Температуру КВД регистрировали термопарой медь-константан.

В качестве исследуемых образцов были выбраны трёхкомпонентные порошковые системы стабилизированного диоксида циркония 80%(ZrO₂+3mol%Y₂O₃)+20% Al₂O₃, с температурой отжига 600 и 900°C. Поликристаллические образцы были синтезированы в Институте общей и неорганической химии НАН Беларуси.

Исходный фазовый состав исследуемых образцов имеет следующее отношение тетрагональной и моноклинной фаз после отжига при 600°C - 59:41%, после отжига при 900°C – 69,6:30,4%.

В ходе исследования проведён анализ температурных зависимостей электросопротивления образцов, на основании чего можно судить о существовании структурных изменений в интервалах давлений: (25 – 27) ГПа, (35 – 38) ГПа и (45-47) ГПа.

Так же исследованы зависимости электросопротивления от времени в области давлений (22-50) ГПа при комнатной температуре. Полученные зависимости выявили закономерность увеличения характерных времён релаксации при приближении к точке фазового перехода при (35-37) ГПа и (45-47) ГПа, а также зависимость величины характерных времён релаксации от исходного фазового состава.

Выявленные области изменения электрофизических характеристик диоксида циркония коррелируют с уже известными областями фазовых переходов и позволяют уточнить фазовую диаграмму в области высоких давлений и температур, поскольку в данной области она наименее изучена.

**УЧЕТ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ПРИ ИЗУЧЕНИИ
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ
ФЕРРОЖИДКОСТЕЙ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ**

Соловьёва А.Ю.*, Елфимова Е.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: anita_zy@mail.ru

Информацию о феррожидкости как о термодинамической системе во внешнем однородном магнитном поле можно получить с помощью такого универсального параметра, как свободная энергия. Зная аналитическое выражение для этой величины, можно определить такие характеристики феррожидкости, как намагниченность, магнитная восприимчивость, теплоемкость, давление и т.п. В данной работе предложен метод, позволяющий учитывать многочастичные корреляции в системах с анизотропными межчастичными взаимодействиями. Метод успешно применен для определения аналитической зависимости свободной энергии концентрированной феррожидкости во внешнем однородном магнитном поле от режимных параметров системы.

Свободная энергия системы дипольных твердых сфер была представлена в виде суммы:

$$F = F_s + F_m + \Delta F, \quad F_s = \ln \varphi + \frac{\varphi(4-3\varphi)}{(1-\varphi)^2}, \quad F_m = -Nk_B T \ln \left(\frac{\text{sh} \alpha}{\alpha} \right), \quad (1)$$

где F_s – аппроксимация Карнагана–Старлинга свободной энергии твердых сфер, φ – объемная концентрация, F_m – свободная энергия идеального парамагнитного газа феррочастиц, N – число феррочастиц в системе, $k_B T$ – тепловая энергия, α – параметр Ланжевена, ΔF – вклад диполь-дипольных взаимодействий в свободную энергию.

Для определения ΔF использовалось классическое вириальное разложение в ряд по объемной концентрации феррочастиц. Поскольку в исследуемой системе каждый вириальный коэффициент является функцией от интенсивности диполь-дипольного взаимодействия, был использован метод разложения каждого коэффициента в ряд по параметру диполь-дипольного взаимодействия λ . Были получены аналитические выражения второго и третьего вириальных коэффициентов с точностью до λ^2 :

$$\Delta F = -Nk_B T \{ B_2(\lambda, \alpha)\varphi + B_3(\lambda, \alpha)\varphi^2 \}. \quad (2)$$

С целью расширения области применимости (2) было проведено обратное кумулянтное преобразование построенного вириального ряда (2) к логарифмическому виду:

$$\Delta F = -Nk_B T \ln \left(1 + I_1(\lambda, \alpha)\varphi + I_2(\lambda, \alpha)\varphi^2 \right). \quad (3)$$

Неизвестные параметры $I_1(\lambda, \alpha)$ и $I_2(\lambda, \alpha)$ находились из разложения функции логарифма по формуле Тейлора с последующим сопоставлением коэффициентов при одинаковых степенях φ .

Проведено сравнение построенной теории с данными компьютерного эксперимента. Получено хорошее согласование результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Уральского федерального университета им. первого Президента России Б.Н. Ельцина и Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 12-02-31079).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ИЗОЛИРОВАННЫМИ МИКРО- И НАНОДОМЕНАМИ ПРИ ЛОКАЛЬНОМ ПЕРЕКЛЮЧЕНИИ ПОЛЯРИЗАЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ

Турыгин А.П.*, Иевлев А.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, ИЕН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: antonturygin@mail.ru

Активное исследование доменной структуры в монокристаллах ниобата лития (LN) в последние годы стимулировано созданием преобразователей длины волны лазерного излучения в периодически поляризованном LN и разработкой устройств хранения информации со сверхвысокой плотностью.

Для исследования доменной структуры с высоким пространственным разрешением используется сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ). Основным СЗМ режимом, позволяющим создавать и исследовать нанодоменные структуры, является силовая микроскопия пьезоэлектрического отклика. Однако процесс переключения поляризации в сильно неоднородном поле, создаваемом проводящим зондом СЗМ, до сих пор недостаточно исследован [1]. Изучение эволюции микро- и нанодоменной структуры является важной задачей в области физики сегнетоэлектриков и доменной инженерии.

В данной работе было проведено экспериментальное исследование взаимодействия между изолированными микро- и нанодоменами при переключении поляризации локальным электрическим полем, создаваемым проводящим зондом СЗМ в тонких монокристаллических пластинах LN. Установлено, что при расстоянии между доменными стенками соседних доменов менее 80 нм наблюдался эффект подавления роста нового домена, что приводило к уменьшению его конечных размеров или полному исчезновению.

Были проведены аналитические и численные расчеты пространственного распределения электрических полей. При расчётах полярная компонента локального переключающего поля, E_s , включала в себя несколько компонент:

$$E_s(r, t) = E_{tip}(r, t) + E_{dep}(r, t) + E_{scr}(r, t) + E_b(r, t), \quad (1)$$

где $E_{tip}(r, t)$ – поле, создаваемое зондом СЗМ, $E_{dep}(r, t)$ – деполяризующее поле, $E_{scr}(r, t)$ – поле внешнего экранирования, $E_b(r, t)$ – поле объемного экранирования.

Пространственное распределение поля, создаваемого зондом, рассчитывалось с использованием следующего выражения [2]:

$$E_{tip}(R) = \frac{C_t U_{sw}}{2\pi\epsilon_0(\sqrt{\epsilon_c\epsilon_a} + 1)} \sqrt{\frac{\epsilon_a}{\epsilon_c}} \frac{r_{tip} + \delta}{\left[(r_{tip} + \delta)^2 + R^2 \right]^{3/2}}, \quad (2)$$

где C_t – емкость зондового датчика; ϵ_c и ϵ_a – диэлектрические постоянные LN вдоль полярной оси и перпендикулярно ей соответственно; δ – зазор между кончиком зонда и поверхностью пластины, r_{tip} – радиус зонда.

Выражение для остаточного деполяризующего поля $E_{rd}(r, t) = E_{dep}(r, t) + E_{scr}(r, t)$, полученное методом интегральных преобразований, имеет достаточно сложный вид.

Проведенные теоретические расчеты позволили объяснить все полученные экспериментальные результаты.

1. Shur V.Ya., Ievlev A.V., Nikolaeva E.V., Shishkin E.I. and Neradovskiy M.M., J. Appl. Phys., **110**, 5, 052017 (2011)
2. Rodriguez B.J. et al., Appl. Phys. Lett., **86**, 1, 012906 (2005)

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЯХ: РОЛЬ МЕЖЧАСТИЧНЫХ
КОРРЕЛЯЦИЙ

Турышева Е.В.* , Елфимова Е.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: tais_kat@list.ru

Магнитные жидкости представляют собой устойчивые взвеси частиц ферро- и ферромагнитных материалов в жидкостях-носителях. Малый размер дисперсных феррочастиц обеспечивает наличие у каждой частицы собственного магнитного момента. За счёт этого магнитные жидкости способны ощутимо взаимодействовать с внешним магнитным полем, сохраняя физические свойства жидкого состояния. Такая уникальная комбинация приводит, с одной стороны, к многим неожиданным физико-химическим эффектам. С другой стороны, это позволяет отнести магнитные жидкости к классу материалов с управляемыми свойствами, что является основой их активного применения в современных технологиях [1].

К числу уникальных явлений относится фазовое расслоение магнитной жидкости [2]. Это явление аналогично конденсационному фазовому переходу первого рода в молекулярных системах и сопровождается появлением микрокапельных агрегатов. Фазовый переход наблюдается в физических экспериментах. При этом результаты теоретических исследований качественно описывают эксперименты (физические и компьютерные), однако не дают количественного согласия.

В данной работе исследуется явление фазового перехода в магнитной жидкости, которая моделируется монодисперсной системой дипольных сфер. Для описания немагнитных межчастичных сил притяжения используется потенциал «прямоугольная потенциальная яма». Используя методы статистической физики, была определена свободная энергия исследуемой системы в виде вириального ряда по концентрации феррочастиц. Вычислены второй и третий вириальные коэффициенты. На основе полученного аналитического выражения для свободной энергии была записана система уравнений, описывающая условие равновесия фаз с высокой и низкой концентрацией магнитных частиц.

В результате построены фазовые диаграммы в зависимости от физико-химических условий системы. Определены критические значения температуры и концентрации для различных значений параметров потенциальной ямы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Уральского федерального университета им. первого Президента России Б.Н. Ельцина и Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 12-02-31079).

1. Елфимова Е.А., Иванов А.О., ЖЭТФ, **138**, 162 (2010)
2. Cousin F, Dubois E., Cabuil V, Phys. Rev. E., **68**, 021405 (2003)

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ
МЕДИ ПРИ СИНТЕЗЕ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ

Чепкасов И.В.*, Гафнер Ю.Я.

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан, Россия

*E-mail: ilya_chepkasov@mail.ru

В данной работе методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи (*tight-binding*) были исследованы процессы конденсации наночастиц Cu из высокотемпературной газовой фазы. Для изучения влияния скорости охлаждения и конечной температуры на физические параметры синтезированных наночастиц было смоделировано охлаждение системы с тремя различными скоростями $U = 2 \cdot 10^9$ К/с, $U = 1 \cdot 10^9$ К/с и $U = 2 \cdot 10^8$ К/с и двумя конечными температурами ($T = 373$ К и $T = 77$ К). Выбор таких конечных температур был вызван тем, что на промышленно-экспериментальных установках по получению нанопорошков металлов используют в качестве охлаждающей жидкости как жидкий азот с температурой 77 К, так и обычную воду с температурой кипения 373 К. И очень важно, с точки зрения эффективности промышленных производств, понимать, как различные экспериментальные методики влияют на размер и структуры получаемых наночастиц.

В результате анализа шести компьютерных экспериментов были определены зависимости структур и форм получаемых частиц от скорости охлаждения и конечной температуры системы. В ходе исследований были определены наиболее благоприятные условия для образования кластеров меди с плотноупакованной ГЦК или ГПУ структурой. Данные условия создаются при установившейся в системе скорости охлаждения, равной $U = 2 \cdot 10^8$ К/с, и конечной температуре $T = 373$ К. Форма таких плотноупакованных частиц в основном червеобразная, что связано с процессами агломерации при свободном движении частиц в системе. Частицы с подобными формами имеют большие удельные площади поверхности и могут эффективно использоваться в различных химических реакциях в качестве катализатора.

Для синтеза наночастиц с икосаэдрической структурой наиболее благоприятные условия создаются при скорости охлаждения $U = 2 \cdot 10^9$ К/с и конечной температуре $T = 77$ К. Преимущественное формирование именно этой структуры связано с тем, что при данных значениях конечной температуры и скорости охлаждения из системы быстро удаляется кинетическая энергия, которая была выделена при формировании димеров и тримеров на начальных этапах моделирования. В этом случае у частиц уже не достаточно энергии для длительного хаотического движения и объединения между собой, такие кластеры довольно быстро осаждаются на фильтрах установки с теми структурами и формами, которые они приняли на начальных этапах синтеза. При таких параметрах системы примерно половина получаемых частиц имеет икосаэдрическую структуру и сферичную внешнюю форму, а размер получаемых частиц не превышает 1000 атомов.

По результатам данной работы можно сделать вывод, что структура, форма и размер получаемых частиц зависят в равной степени как от скорости, с которой происходит отвод тепла из системы, так и от конечной температуры охлаждающего вещества. Так, если необходимо получать плотноупакованные частицы большего размера со значительной площадью поверхности, то в экспериментально-промышленных установках необходимо использовать водяное охлаждение. Это позволит достаточно эффективно отводить энергию из системы, не внося значительный вклад в механизмы столкновения и объединения кластеров, что позволит им формировать большие конгломераты. В случае технической необходимости производства более мелкодисперсных частиц в качестве охлаждающего вещества более обоснованным будет использование жидкого азота.

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОДОЗНОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ НАНОПОРОШКОВ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ И ЦИРКОНИЯ

Шабанова К.И.^{1*}, Медведев А.И.^{1,2}, Бекетов И.В.^{1,2}, Чолах С.О.²

¹)Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²)Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: tinka@iep.uran.ru

Поведение наноструктурных керамик в радиационных полях в настоящее время практически невозможно прогнозировать из-за отсутствия экспериментальных данных. Наноматериалы характеризуются малым размером зерен и относительно большим объемом, занимаемым их границами, что создает хорошие предпосылки для аннигиляции и рекомбинации точечных дефектов, возникающих под облучением. Таким образом, исходя из простых физических соображений, следует, что материалы с наноструктурой должны обладать повышенной сопротивляемостью к радиационному воздействию.

Выполнены исследования влияния облучения гамма квантами (энергия 0.8 МэВ, дозы до 2000 Мрад) и быстрыми электронами (энергия 10 МэВ, флюенс до 5×10^{16} частиц/см²) на кристаллическую структуру нанопорошков оксидов алюминия и циркония. Нанопорошки были получены методами электрического взрыва проволоки и лазерного испарения. Показано, что в результате облучения в нанопорошках не происходит изменений фазовых соотношений, средних размеров кристаллитов и объема элементарных ячеек. Однако с увеличением дозы облучения происходит рост микроискажений. Основным видом дефектов, формирующим микроискажения, являются дефекты Френкеля (пары вакансия – атом в междоузлии). В субмикронном порошке Al₂O₃ эффективен дислокационный механизм формирования микроискажений, который приводит к измельчению кристаллитов и частичному снятию напряжений.

Полученные результаты являются основой для понимания процессов, протекающих в нанопорошках и конструкционных керамиках при воздействии на них больших доз облучения быстрыми электронами и γ -квантами, и разработки новых конструкционных радиационно-стойких керамик.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта фундаментальных исследований Программы Президиума РАН «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов».

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР БЕСКОНЕЧНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Шадрин Е.О.*, Мурзашев А.И.

Марийский государственный университет, г. Йошкар-Ола, Россия

*E-mail: shadrineo@yandex.ru

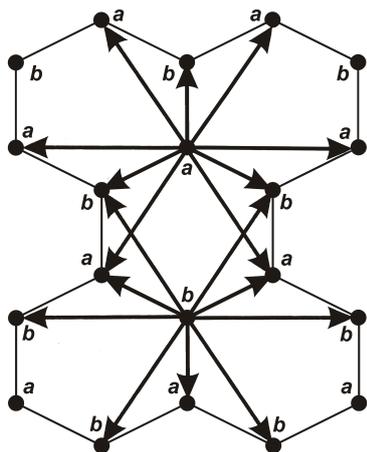


Рис. 1. Схематическое изображение перескоков электронов в узлах УНТ.

К настоящему времени накопленный материал, основанный на расчетах Дресселхауза и др. [1], свидетельствует о том, что углеродные нанотрубки (УНТ) проявляют металлические свойства, если разность хиральных индексов кратна 3. Однако экспериментальные данные не выявляют однозначной зависимости электропроводящих свойств от хиральности [2]. Это, возможно, связано с тем, что не учитывается кулоновское взаимодействие на одном узле, которое достигает, согласно [3], 10 eV.

Расчеты, выполненные в [4], показали, что УНТ независимо от хиральности являются полупроводниками с щелью ~ 1 eV. Однако экспериментальные данные [5] говорят о том, что УНТ являются узкощелевыми полупроводниками с щелью 0.01–0.1 eV. Такое расхождение, возможно, связано с тем, что в [4] не учитывались перескоки электронов с узла на следующий за соседним узел (рис. 1). На рисунке 1 показан фрагмент гексагональной углеродной плоскости, где выделены два типа формально неэквивалентных узлов «a» и «b». Такое разделение необходимо при расчете энергетического спектра, так как проекции векторов таких узлов различны. Вектора показывают исследуемые перескоки электронов. Полученную систему мы описываем гамильтонианом модели Хаббарда:

Полученную систему мы описываем гамильтонианом модели Хаббарда:

$$H = \varepsilon \sum_{i,\sigma} (a_{i,\sigma}^+ a_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^+ b_{i,\sigma}) + B_0 \sum_{i,j \neq i,\sigma} (a_{i,\sigma}^+ b_{j,\sigma} + b_{j,\sigma}^+ a_{i,\sigma}) + B_1 \sum_{i,j \neq i,\sigma} (a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} + a_{j,\sigma}^+ a_{i,\sigma}) + U \sum_{i,j \neq i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i,\bar{\sigma}}$$

Параметры U и B_0 брались из работ [6, 7], где изучался спектр оптического поглощения фуллеренов C_{60} [6] и C_{70} [7], они равны $U \approx 7.0$ eV, $B_0 \approx -1.0$ eV. Значение интеграла перескока B_1 между узлами a - a определено так, что щель в спектре была порядка 0.1 eV, и равно $B_1 \approx -0.36$ eV. Результаты расчетов при данных параметрах показывают, что щель в энергетическом спектре УНТ хиральностей (5.5), (9.0), (10.0), (12.0) и (15.0) составляет 0.05 ÷ 0.075 eV.

Таким образом, учет дальних перескоков электронов приводит к уменьшению щели, и можно сделать вывод, что исследуемые УНТ являются узкощелевыми полупроводниками.

1. Satio R., Fujita M., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S., Phys. Rev. B, **46**, 1804 (1992)
2. Елецкий А.В., УФН, **179**, 225 (2009)
3. Wehling T.O., Sasioglu E., Friedrich C. et al., Phys. Rev. Lett., **106**, 236805 (2011)
4. Мурзашев А.И., Шадрин Е.О., ФТТ, **54**, 2176 (2012)
5. Min Ouyang, Jin-Lin Huang, Chin Li Cheung, Charles M., Lieber. Science, **292**, 702 (2001)
6. Миронов Г.И., Мурзашев А.И., ФТТ, **53**, 2273 (2011)
7. Мурзашев А.И., Известия вузов. Физика, **55**, 5, 49 (2012)

Биофизика

БИОФИЗИКА

~ o ~

ИЗМЕРЕНИЕ ДВУХФАЗНОЙ РЕЛАКСАЦИОННОЙ КРИВОЙ ПАЛЬЦЕВ *in vivo*
НА ПОРТАТИВНОМ ЯМР-РЕЛАКСОМЕТРЕ

Земцов А.Д.* , Сапунов В.А., Нархов Е.Д.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, ФТИ, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: zzemchik@mail.ru

В докладе представлен опыт использования портативного ЯМР релаксометра NP-1 (производитель ООО «ИДЕЯ-РЕЗОНАНС», г. Казань по заказу НИЛ КМ УрФУ) для регистрации релаксационной кривой протонов в пальцах человеческой руки. Диапазон измерения от 10 мс до 1 сек при частоте протонного магнитного резонанса 10.15 МГц (индукция поля постоянного магнита 0.238 Тл). Релаксометр NP-1 первоначально был предназначен для решения задач нефтегазовой геофизики, в частности исследования водонефтяных смесей и керенов с размером до 30 мм, но методы ЯМР релаксометрии постоянно находят все новое применение благодаря своей высокой точности и универсальности.

В рамках представленной работы показана возможность применения портативного релаксометра NP-1 в области медицины и биофизики, в частности исследований живого объекта – большого пальца человеческой руки. Исследования проводились на студентах и сотрудниках ФТИ УрФУ.

Одной из основных задач было нахождение оптимальных параметров ЯМР-релаксометра NP-1 (период запуска, число импульсов, интервал между 180° импульсами, частота импульсов) для увеличения точности дальнейших измерений времен спин-спиновой релаксации и многоэкспоненциального анализа. Показана применимость релаксометра NP-1 для изучения релаксационных параметров крови в пальцах испытуемых *in vivo*. Выбраны надлежащие параметры импульсной последовательности Карра-Парселла-Мейбума-Гилла [1].

Параметрами исследования были короткое (около 10 мс) и длинное (более 0.1 секунд) времена спин-спиновой релаксации человеческих пальцев для дальнейшей интерпретации полученных данных и увязывания их с некоторыми параметрами испытуемых (возраст, вес, рост, кровяное давление, пульс и т.п., включая диагностированные заболевания). Предполагается зависимость времен релаксации и наличия вязкой компоненты в пальцах испытуемых от их предрасположенности к каким либо заболеваниям, поскольку подобные зависимости были получены в нескольких научных работах в отношении, например слюны [2] и плазмы крови [3].

1. Вашман А.А., Пронич И.С., Ядерная магнитная релаксационная спектроскопия, Энергоатомиздат (1986)
2. Bertram H.C., Eggers N., Eller N., *Analytical Chemistry*, **81**, 9188 (2009)
3. Чистякова С.А., Магнитная резонансная релаксометрия в исследовании плазмы крови здоровых и онкологически больных женщин, Институт повышения квалификации Федерального управления медико-биологических и экстремальных проблем при Министерстве здравоохранения Российской Федерации (2004)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИОННЫХ КАНАЛОВ В КАРДИОМИОЦИТЕ В РАМКАХ ЭЛЕКТРОННО-КОНФОРМАЦИОННОЙ ТЕОРИИ

Рывкин А.М.^{1,2}, Зорин Н.М.^{1*}, Москвин А.С.^{1,2}¹Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия²Институт иммунологии и физиологии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*E-mail: kolyazorin@gmail.com

Кальциевые рианодинные каналы (RyR) являются одним из ключевых объектов математического моделирования процессов электромеханического сопряжения в клетках сердечной мышцы. Исследования нелинейной динамики ионных каналов позволят глубже изучить процесс кальциевого обмена и сокращений в сердечной клетке (кардиомиоците). Изменение концентрации Ca^{2+} в клетке, необходимого для обеспечения сократительной активности клетки в течение сократительного цикла, происходит в результате сложного процесса, называемого «кальцием вызванное высвобождение кальция» (КВВК).

Разработанная ранее [1, 2] электронно-конформационная модель (ЭКМ) динамики RyR-канала предполагает существование двух степеней свободы ионного канала: электронной (быстрой) и конформационной (медленной). Процессы активации и инактивации включают прямые («франк-кондоновские») переходы между двумя ветвями конформационного потенциала, ланжевеновскую конформационную динамику медленной степени свободы и непрямые переходы, связанные с термофлуктуациями и квантовыми эффектами («туннелированием»).

Проводя серию компьютерных экспериментов по изучению динамики RyR-каналов при изменении концентрации Ca^{2+} , мы обнаружили эффект задержки туннельных переходов, связанный с медленной конформационной динамикой, в частности с движением в сторону локального минимума близ энергетического барьера. Туннелирование может происходить в малой окрестности локального минимума.

Суть данного эффекта состоит в том, что вследствие изменения формы потенциала и сдвига минимумов системе требуется определенное время для адаптации к новой форме потенциала. При достаточно больших скоростях изменения концентрации кальция система не успевает достаточно приблизиться к локальному минимуму, вследствие чего туннельных переходов не наблюдается.

Также мы изучили влияние термофлуктуаций на кинетические свойства движения системы в случае изменения формы конформационного потенциала одиночного канала. При этом мы наблюдали NES-эффект (noise enhanced stability, «Шум, повышающий стабильность») [3]. Этот эффект состоит в том, что время прохождения системой от точки метастабильного состояния до точки устойчивого равновесия (глобального минимума) может увеличиваться с ростом интенсивности шума в определенном диапазоне. Экспериментальные исследования конформационной динамики различных биофизических нанобъектов показывают, что в определенном диапазоне параметров, действительно, при присутствии различных шумов (термофлуктуаций, внешних воздействий и пр.) наблюдались задержки переходов данных объектов из одного состояния в другое, то есть наблюдалось усиление стабильности системы [4].

1. Moskvin A.S., Ryvkin A.M., Solovyova O.E., Markhasin V.S., JETP Letters, **93**, 403 (2011)
2. Рывкин А.М., Москвин А.С., Соловьева О.Э., Мархасин В.С., Доклады академии наук, **444**, 572 (2012)
3. Dubkov A.A., Agudov N.V., Spagnolo B., Phys. Rev. E, **69**, 061103-1 (2004)
4. O'Donnell C., Implications of stochastic ion channel gating and dendritic spine plasticity for neural information processing and storage, University of Edinburgh (2011)

ЭПР в биоапатитах для калибровки источников ионизирующего излучения

Семеняк Д.Н.^{1*}, Иванов Д.В.^{1,2}, Швачко Ю.Н.²

¹Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: semenyak.d@gmail.com

Считается доказанным, что интенсивность сигнала ЭПР от пероксидных радикалов (POR) в биоапатитах является количественной характеристикой поглощенной дозы ионизирующего излучения. Это справедливо для рентгеновского, гамма-, бета- и ультрафиолетового излучений. Экспериментальные доказательства получены в результате крупномасштабных исследований по ЭПР-дозиметрии при реконструкции дозовых нагрузок в районах ядерного взрыва в Хиросиме [1, 2], Чернобыльской аварии [3], Восточно-Уральского радиоактивного следа (ВУРС) [4], испытаний на Тоцком полигоне [5].

Биоапатиты – минерализованная составляющая костных тканей, дентина, зубных эмалей, – являются уникальным материалом, в котором в поликристаллическую матрицу гидроксиллапатита $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ на стадии биогенеза встраиваются карбонатные комплексы CO_3^{2-} , что обуславливает их уникальность и разнообразие, а также высокую чувствительность к ионизирующему излучению. Реальные структуры биоапатитов сложны, и до настоящего времени рентгеновскими методами не удалось разрешить ни одной из них. Существуют лишь качественные модели.

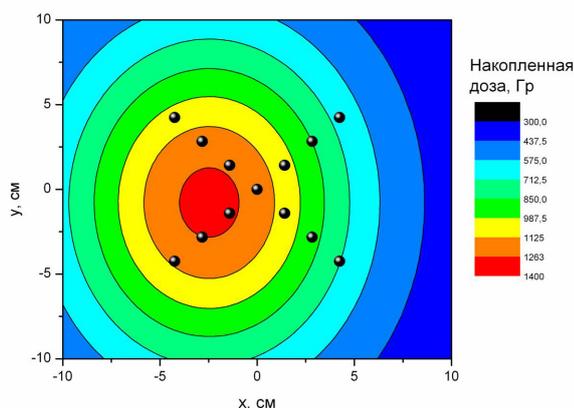


Рис. 1. Радиальное распределение интенсивности в пучке электронов, полученных на микротроне МТ-20.

Конечным продуктом взаимодействия биоапатита с излучением являются радикалы $\cdot\text{O}^-$, $\cdot\text{O}_2^-$, $\cdot\text{O}_3^-$ карбонатных групп CO_2^- , CO_3^- , CO^- , CO_3^{3-} и радикалы фосфатных групп PO_4^{2-} . Доминирующий вклад в сигнал ЭПР дают стабильные POR радикалы от групп CO_2^- , время жизни которых 10^7 лет. Возможность измерения концентрации радиационных дефектов с помощью ЭПР является физической основой для применения поликристаллического биоапатита в качестве датчика для картирования и калибровки пучков медицинских источников излучения. На рис. 1 приведен пример реконструкции распределения интенсивности пучка электронов на ускорителе микротрон МТ-20 в УрФУ.

В настоящее время в ИФМ УрО РАН и Физико-технологическом институте УрФУ ведутся активные исследования по выяснению возможности применения биоапатитов в качестве датчиков для обследования и калибровки медицинских источников ионизирующего излучения. Актуальность таких исследований обусловлена широким использованием излучений в повседневной жизни, при медицинских обследованиях и терапии.

1. Ikeya M. et al., Radiat. Protect. Dos., **17**, 181 (1987)
2. Mascarenhas S. et al., Bull. Am. Phys. Soc., **18**, 579 (1973)
3. Баран Н.П. и др., Доклады АН Украины, **7**, 170 (1993)
4. Romanyukha A.A. et al., Nature, **381**, 199 (1996)
5. Васильева А.Г. и др., Эколого-генетический анализ отдаленных последствий Тоцкого ядерного взрыва Оренбургской области в 1954 году (факты, модели, гипотезы), Екатеринбург, Изд-во "Екатеринбург", 192 (1997)

Авторский указатель

- Ambrosini S.F., 229
- Bouwman W.G., 156
- Flachbart K., 147
- Gabani S., 147
- Kraan W.H., 156
- Priante G., 229
- Rubini S., 229
- Аверкиев Н.С., 149, 176
- Агажанов А.Ш., 212
- Агафонов Л.Ю., 33
- Агзамова П.А., 189
- Акашев А.А., 201
- Аксельрод Л.А., 156
- Акшенцев Ю.Н., 154
- Аливердиев А.А., 202, 203
- Алябьева Л.Н., 117
- Андбаева В.Н., 204, 217
- Андреев С.В., 52, 55
- Аникин М.С., 34
- Анисимов В.И., 36, 50, 57, 67, 76, 84, 95, 105, 109
- Анисимов М.А., 147
- Анохин А.А., 230
- Арапов Ю.Г., 102
- Арапова И.Ю., 139
- Аржников А.К., 70
- Арита Р., 61
- Артемьев Г.А., 13
- Ашиккалиева К.Х., 231
- Бабанов Ю.А., 130
- Бабушкин А.Н., 94, 246
- Бакланова Я.В., 139
- Бакулин А.В., 153, 232
- Бакулин М.А., 141
- Балобанов Е.Н., 190
- Балымов К.Г., 53
- Банникова Н.С., 233
- Баранов Н.В., 59, 162
- Бартковски С., 238
- Бартули Э.Ф., 79
- Барышников К.А., 149, 176
- Бахарев С.М., 99
- Бегунов А.И., 35
- Бекетов И.В., 251
- Белозеров А.С., 36
- Бельтюков А.Л., 85, 86, 181
- Бергер И.Ф., 177
- Берсукер И.Б., 176
- Благодатков Д.В., 245
- Блинов И.В., 37, 74
- Блинова Ю.В., 154
- Бобин С.Б., 100
- Бобров К.С., 80
- Богач А.В., 147
- Богомазова О.Б., 45
- Боев М.Л., 38
- Болотин К.Е., 39
- Болтаев А.П., 114
- Болячкин А.С., 40, 42
- Бондаренко Ю.М., 155
- Бордулев Ю.С., 191
- Борисова А.Б., 125
- Бородин Е.М., 173
- Брызгалов А.Н., 158
- Будина А.А., 63
- Буйнова Л.Н., 160
- Букреев Д.А., 221
- Бурда В.В., 135
- Бурков В.И., 117
- Бусов К.А., 205
- Бучельников В.Д., 47, 69
- Быков Р.В., 123, 129
- Вайнштейн И.А., 133
- Валиев Р.З., 238
- Валова-Захаревская Е.Г., 234
- Васильев А.Н., 71
- Васин М.Г., 14
- Васьковский В.О., 44, 53
- Вейнгер А.И., 65
- Величко Е.В., 156
- Верховский С.В., 139, 140, 142
- Вершинин А.В., 41
- Власов В.С., 16, 46, 63, 107
- Волегов А.С., 40, 42, 52, 55, 91
- Волков А.В., 189

- Волков А.Ю., 87
Волков В.А., 236
Волков П.В., 158
Волкова З.Н., 140
Волокитина Т.Л., 157
Волосников Д.В., 13
Воронин В.И., 177
Воронова Л.М., 159, 167, 168, 180
Вохминцев А.С., 133, 235, 239
Гаврилкин С.Ю., 147
Галичян Т.А., 72
Гапонцева Н.Н., 101
Гапонцева Т.М., 159
Гареева З.В., 66
Гафнер Ю.Я., 250
Гераськин А.А., 71
Геращенко А.П., 139, 140, 142
Геращенко Е.Ю., 241
Гижевский Б.А., 17
Гильмутдинов И.Ф., 43, 64
Гладковский С.В., 173
Глушков В.В., 147
Гобов Ю.Л., 189, 194
Говоркова Т.Е., 100
Голоденко Н.Н., 178
Голощяпов С.И., 65
Горбачёв И.И., 81
Гордиенко А.Б., 134
Горьковенко А.Н., 44
Гохфельд Н.В., 160
Григорьев С.В., 156
Гришина К.А., 206
Гудин С.А., 101
Гудина С.В., 102, 106
Гудков В.В., 149, 176
Гуляев Р.В., 131
Гумеров А.М., 45
Гундеров Д.В., 238
Гурашкин А.Л., 207
Давлетшина А.Д., 103
Давыдов В.Ю., 127
Дегтярев М.В., 159, 167, 168, 180
Демидов А.А., 35
Демидов Е.С., 237
Демишев С.В., 147
Денисов А.Ю., 195
Денисова Т.А., 139
Деревянко М.С., 221
Дерюшкин В.В., 100
Дерягина И.Л., 18, 234
Дианов М.Ю., 46
Диденко В.Д., 51
Дмитриев С.В., 90
Добросмыслов С.С., 104
Дорошева И.Б., 235
Дремов В.В., 76
Дробосюк М.О., 47
Дробот А.В., 161
Дышлюк А.В., 118
Дьяченко А.А., 105
Европейцев Е.А., 237
Елисеева Н.С., 243
Елсуков Е.П., 236
Елфимова Е.А., 48, 247, 249
Елькин И.А., 236
Епифанов Ю.А., 48
Еремичев С.С., 110
Ефимов Н.Н., 51
Ефремов А.В., 50, 119, 198
Жевстовских И.В., 149, 176
Железнякова А.А., 120
Живулин Д.Е., 158
Журавлев К.С., 127
Забенкин В.Н., 156
Залогина А.С., 121, 126
Заяц С.В., 222
Звездин А.К., 66
Зельдович В.И., 185
Земцов А.Д., 255
Зинин А.В., 34
Зорин Н.М., 256
Зубарев Н.М., 225
Зюзин А.М., 141
Ибрахим П.Н.Г., 162
Иванов А.А., 58, 111, 112
Иванов Д.В., 257
Иванов Р.П., 49
Ивина Н.Л., 110
Игошев П.А., 50
Иевлев А.В., 248
Ильин А.П., 20
Ильин Д.О., 235
Инюшкин А.В., 99
Ирхин В.Ю., 70

- Кабанов С.С., 49
 Кайгородов А.С., 223
 Камаева Л.В., 82, 214
 Камаева Ю.А., 163
 Каменский И.Ю., 233
 Каныгина О.Н., 231
 Караева Ю.В., 208
 Карзанова М.В., 237
 Катаев В.А., 108
 Катанин А.А., 50
 Кашин И.В., 83
 Кесарев А.Г., 164
 Кецко В.А., 71
 Ким Г.А., 122
 Кирдянкин Д.И., 51
 Кирко В.И., 104
 Кирпичёва О.А., 107
 Кирушев М.С., 16
 Кислов Е.А., 224
 Клейнерман Н.М., 41
 Клепикова А.С., 106
 Ключева С.Ю., 165
 Клюкин И.В., 87, 170
 Ковалевский К.А., 110
 Козлов К.А., 175
 Козловский Ю.М., 209
 Комаров Ф.А., 52
 Комарский А.А., 224
 Кондратьев В.В., 164
 Корепанов А.Ю., 85, 86
 Королёв А.В., 101
 Королёв М.Н., 181
 Коротаев Е.В., 123, 124, 129
 Коротин Д.М., 57, 238
 Корх М.К., 192
 Костин Г.А., 124
 Костоусова Т.А., 166
 Косых А.С., 239
 Котов Л.Н., 16, 46, 107, 143
 Коуров Н.И., 160
 Кочурин Е.А., 225
 Кравец Н.А., 239
 Кравцов Е.А., 245
 Красноперова Ю.Г., 167, 168
 Кривошеина В.В., 169
 Криницина Т.П., 154
 Кругликов Н.А., 170
 Крючкова Н.А., 124
 Кудияров В.Н., 126, 171
 Кудреватых Н.В., 42, 52, 55
 Кудрявцев Р.В., 45
 Кудряшова О.В., 193
 Кузнецов В.Л., 224
 Кузнецов Д.Д., 172
 Кузнецов П.А., 241
 Кузнецова Е.И., 154
 Кузьмин В.А., 210
 Кулагин Н.Е., 66
 Кулеев И.Г., 99
 Кулеев И.И., 99
 Кулеш Н.А., 53
 Кулькова С.Е., 153, 232
 Кульченков Е.А., 35
 Куркин М.И., 101
 Курляндская Г.В., 221
 Курмаев Э.З., 238
 Кутергина Н.А., 210
 Кютт Р.Н., 127
 Лавриков Р.Д., 173
 Лаврухина С.А., 124
 Ладьянов В.И., 85, 86, 181
 Лапина Ю.В., 54
 Лаптев Р.С., 191
 Ласёк М.П., 107
 Левченко А.В., 147
 Леонов И.В., 36
 Лепаловский В.Н., 44
 Леушина В.С., 87
 Лидер А.М., 121, 126, 169
 Литвинов А.В., 175
 Литвинов Б.В., 185
 Лобанов Б.В., 240
 Ловчиков Д.В., 158
 Ломаев И.Л., 164
 Лончаков А.Т., 100
 Лопатин М.Л., 174
 Лукоянов А.В., 76, 84, 95, 105, 109, 119
 Лысов М.С., 33
 Ляшков К.А., 175
 Мажейко Н.А., 205
 Мазалов Л.Н., 124
 Мазеева А.К., 241
 Мазуренко В.В., 83, 95
 Макарова Т.Л., 65

- Максимов В.И., 21
Максимова Н.К., 161
Малин Т.В., 127
Мальцев В.Н., 56
Маркин П.Е., 52
Матвеев С.А., 37
Матюхин П.В., 155
Маякин В.Ю., 149, 176
Медведев А.И., 251
Мельников А.А., 51
Мельникова А.А., 110
Мельникова Н.В., 88, 91, 94
Меньшенин В.В., 62
Меньшикова С.Г., 85, 86
Меренцов А.И., 177
Миляев М.А., 233, 244
Михайлов А.В., 194
Михайлов С.Б., 218
Михайлова Н.А., 218
Михалев К.Н., 139
Михалев К.Н., 22
Михалицына Е.А., 108
Михалёв К.Н., 140
Мицен К.В., 147
Моисеев А.А., 221
Монахов А.М., 176
Морозов Н.И., 123, 129
Москвин А.С., 256
Мостовщиков А.В., 242
Мостовщикова Е.В., 120, 125
Муравьев В.В., 190
Мурзашев А.И., 240, 252
Муртазин Р.Р., 45
Мухамедшин И.Р., 23, 43, 64
Мухгалин В.В., 85
Мушников Н.В., 41
Нагибин Г.Е., 104
Нархов Е.Д., 195, 255
Наумов С.В., 125
Наумова Л.И., 233, 244, 245
Неверов В.Н., 102, 106, 111
Незнахин Д.С., 55
Нейфельд Э.А., 101
Некрасов И.А., 128
Нестеренко А.А., 56
Николаев Н.Н., 24
Николаева А.Н., 121, 126
Ничипурук А.П., 196, 198
Новикова О.С., 87
Новицкий Н.Н., 71
Новоселов Д.Ю., 57, 109
Ногин В.С., 197, 198
Нойманн М., 238
Носова Э.В., 122
Нугаева Л.Л., 91
Овчинникова И.Г., 122
Оглобличев В.В., 74, 142
Огнева М.С., 192
Огнева М.С., 196, 197
Окулов В.И., 100
Окуловский Ю.С., 213
Орлов В.А., 58
Орлов Л.К., 110
Орлов М.Л., 110
Орлова И.Н., 58
Осадченко В.Х., 34
Осинных И.В., 127
Павлов Н.С., 128
Павлухина О.О., 47
Пампура Е.М., 56
Памятных Л.А., 33
Панков А.С., 211
Панфилов П.Е., 184
Пархоменко В.Д., 21
Пасынков А.Ю., 81
Пацелов А.М., 159, 173, 184
Паянен Р.И., 148
Перегудова Н.Н., 123, 129
Периг А.В., 178
Петров В.П., 179
Петухов Д.С., 111, 112
Петухова О.Е., 111, 112
Печина Е.А., 181
Пилюгин В.П., 26, 159, 160, 182, 184
Пименов И.В., 110
Пинигина К.С., 88
Пискунов Ю.В., 142
Пичугин А.Ю., 123, 129
Плешев Д.А., 16
Пляшкевич В.А., 131
Подгорных С.М., 39, 102
Покрышкина Д.К., 167, 180
Пономарев Д.А., 130
Попков А.Ф., 66

- Попов В.В., 37, 132, 172, 182
 Попов З.И., 104, 174, 243
 Попова Е.Н., 18, 182, 234
 Потеряев А.И., 50, 67
 Проглядо В.В., 233, 244
 Проскурина Е.П., 59
 Протасов Д.Ю., 127
 Прошкин А.В., 59
 Прошкин А.И., 60
 Пудонин Ф.А., 114
 Пушилина Н.С., 121, 126, 169, 171
 Пушкин В.Г., 160
 Пчелкина З.В., 61
 Радзивончик Д.И., 62
 Размыслов И.Н., 63
 Рамалданова А.А., 241
 Реснина Н.Н., 168
 Реутов Ю.Я., 189
 Решетников А.В., 205
 Ригмант М.Б., 192
 Родыгина А.В., 181
 Романов Е.П., 18
 Русинов Г.Л., 122
 Рывкин А.М., 256
 Рыжов В.Н., 89
 Рыльцев Р.Е., 89
 Рютин С.Б., 27
 Рябова Т.А., 244
 Рябухина М.В., 245
 Сабаев С.Н., 141
 Савин П.А., 44
 Савченко И.В., 212
 Садовский М.В., 128
 Садыков А.Ф., 139, 142
 Сажина Е.Ю., 197
 Саламатов Ю.А., 130
 Салосин М.А., 43, 64
 Самарин Н.А., 147
 Сапунов В.А., 195, 255
 Сарычев М.Н., 149, 176
 Свалов А.В., 53
 Седов В.Е., 176
 Селезнёва Н.В., 59, 162, 177
 Семенихин П.В., 65
 Семенова Ю.Н., 246
 Семеняк Д.Н., 257
 Семиров А.В., 221
 Семушкина Г.И., 124, 131
 Сергеев А.В., 132
 Сергейченко Н.В., 161
 Сериков В.В., 41
 Скорняков С.Л., 109, 119
 Скрипов П.В., 27
 Случанко Н.Е., 147
 Смирнов А.Н., 127
 Смольников А.Г., 142
 Смородинский Я.Г., 194
 Смотрицкий А.А., 213
 Соколовский В.В., 47, 69
 Солин Н.И., 125
 Соловьёв И.В., 61
 Соловьёв С.В., 66
 Соловьёва А.Ю., 247
 Соломонов В.И., 127
 Сомова В.М., 197
 Соснин Р.И., 67
 Сотников А.В., 123, 129
 Спиридонов Д.М., 133
 Спирина А.В., 127
 Станкус С.В., 209, 212
 Сташков А.Н., 196–198
 Сташкова Л.А., 197
 Степанова Н.Н., 192
 Степанцов Е.А., 54
 Стерхова И.В., 82, 214
 Стогний А.И., 71
 Столбовский А.В., 172, 182
 Сударева С.В., 154
 Сумин Г.В., 183
 Суслов А.А., 86
 Счастливец В.М., 165
 Сыроквашин М.М., 123, 129
 Табачникова Т.И., 165
 Танцюра А.О., 68
 Тараненко И.А., 69
 Тарасов Е.Н., 34
 Таскаев С.В., 47, 69
 Твердохлебов С.И., 157
 Тебеньков А.В., 91
 Телегин А.В., 54, 120
 Телегин С.В., 120, 125
 Тимиргазин М.А., 70
 Типеев А.О., 215, 216
 Тиснек Т.В., 65

- Титов А.Н., 177, 230
Толмачев Т.П., 184
Торгов В.Г., 124
Трахунова И.А., 208
Труханов А.В., 71
Труханов С.В., 71
Турков В.К., 63
Турыгин А.П., 248
Турышева Е.В., 249
Тюлюмджиев Э.А., 51
Угрюмова Н.А., 101
Удодов В.Н., 93
Упоров С.А., 230
Файзуллин Р.Р., 47
Федоренко А.Д., 124
Филипов В.Б., 147
Филиппов А.Л., 88, 91
Филиппов С.И., 134
Фирсова Т.О., 72
Фомичева Е.Е., 135
Фролова Н.Ю., 185
Хайлов И.П., 157
Халиков А.Р., 90
Харин Е.В., 73
Харус Г.И., 106
Хейфец А.Э., 185
Хейфец О.Л., 88, 91, 94
Хомская И.В., 185
Хотиенкова М.Н., 217
Цветкова К.Ю., 218
Цупий С.Ю., 186
Чайкин Д.В., 239
Чарикова Т.Б., 111, 112
Чащухина Т.И., 159, 167, 168, 180
Чепкасов И.В., 250
Чепусов А.С., 224
Чернов А.А., 28
Четвериков Ю.О., 156
Чигиринский Ю.И., 237
Чолах С.О., 238, 251
Чукин А.В., 163, 183
Чулкина А.А., 236
Чупраков С.А., 74
Чухарев В.Ф., 167
Шабанова К.И., 251
Шабашов В.А., 175
Шабунин М.Е., 93
Шабунина Е.В., 93
Шавров В.Г., 16, 46
Шадрин Е.О., 252
Шакиров Э.Ф., 91, 94
Шангина Е.Л., 113
Шарафутдинов М.Р., 230
Швачко Ю.Н., 257
Шеболкин М.Л., 143
Шеин И.Р., 139
Шелушинина Н.Г., 106
Шерокалова Е.М., 59
Шерстнев И.А., 114
Шефтель Е.Н., 73
Шицевалова Н.Ю., 147
Шишкин Д.А., 75
Шкварин А.С., 29
Шкварина Е.Г., 230
Шмаков И.Г., 179
Шориков А.О., 67, 76, 84, 95, 105
Шорохов Е.В., 172
Шуняев К.Ю., 89
Щеглов В.И., 16, 46
Щелкачев Н.М., 30, 89
Юшакова С.И., 96
Якимова Е.Н., 206
Яковенкова Л.И., 166
Яковлева И.Л., 165
Якунин М.В., 102, 106
Ямпольский А.Д., 207, 213
Янцен Н.В., 141
Яскевич Т.М., 186
Яцук О.С., 209

Институт физики металлов УрО РАН

<http://www.imp.uran.ru>



Директор Института,
академик РАН,
УСТИНОВ
Владимир Васильевич

Институт физики металлов – крупнейший на Урале институт физического профиля, основанный в 1932 г. на базе Ленинградского физико-технического института. В институте работали всемирно известные ученые академики АН СССР С.В. Вонсовский, В.Д. Садовский Ю.А. Изюмов, член-корр. АН СССР М.Н. Михеев. В настоящее время в Институте работают 800 человек, в том числе 3 академика и 6 член-корреспондентов РАН, 89 докторов и 197 кандидатов наук. Институт осуществляет подготовку кадров высшей квалификации в аспирантуре и докторантуре.

Основные направления фундаментальных и прикладных исследований:

- электронная структура, межэлектронные взаимодействия и физические свойства переходных, редкоземельных и актиноидных металлов, сплавов и соединений на их основе, низкоразмерных систем;
- магнитные структуры, спиновый транспорт и методы направленной модификации физических свойств новых функциональных материалов на основе металлических и полупроводниковых соединений в кристаллическом, наноструктурном и аморфном состояниях;
- физические основы диагностики сложных систем из металлических материалов и изделий с помощью электромагнитных и акустических полей;
- дислокационные структуры, фазовые переходы и физико-механические свойства сталей и сплавов цветных и драгоценных металлов, интерметаллидов и композитов; разработка перспективных конструкционных материалов;
- атомно-структурные превращения, нелинейные явления и неравновесные процессы в конденсированных средах при интенсивных радиационных, термических, деформационных и ударных воздействиях.



Научные подразделения:

Отдел исследований вещества при экстремальных воздействиях: лаборатория нейтронных исследований вещества; лаборатория неравновесных процессов и структур; лаборатория электронных свойств вещества при высоких давлениях.

Отдел магнитных материалов: лаборатория микромагнетизма; лаборатория прикладного магнетизма; лаборатория ферромагнитных сплавов.

Отдел материаловедения: лаборатория механических свойств; лаборатория физического металловедения; лаборатория цветных сплавов.

Отдел наноспинтроники: лаборатория диффузии; лаборатория кинетических явлений; лаборатория магнитных полупроводников; лаборатория низких температур; лаборатория электрических явлений; лаборатория электронной спектроскопии.

Отдел неразрушающего контроля: лаборатория акустических методов; лаборатория дефектоскопии; лаборатория комплексных методов контроля; лаборатория магнитного структурного анализа; лаборатория термомагнитной обработки.

Отдел прецизионной металлургии: лаборатория прецизионных сплавов и интерметаллидов; сектор синтеза сплавов и монокристаллов.

Отдел теоретической и математической физики: лаборатория квантовой теории конденсированного состояния; лаборатория теоретической физики; лаборатория теории нелинейных явлений.

Отдел физики деформации: лаборатория прочности; лаборатория физики высоких давлений.

Отдел электронных свойств: лаборатория оптики металлов; лаборатория полупроводников и полуметаллов; лаборатория рентгеновской спектроскопии.



Центр коллективного пользования: «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов»

Отделы: электронной микроскопии; рентгеноструктурного анализа; магнитных измерений; механических испытаний; сектор криожидкостных технологий

620990 г.Екатеринбург, ул. С.Ковалевской 18,
e-mail: physics@imp.uran.ru

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук
(ИТФ УрО РАН)**

В соответствии с Уставом ИТФ УрО РАН проводит исследования по *трёх научным направлениям*:

- неравновесные процессы с фазовыми превращениями;
- теплофизические свойства веществ в стабильных и метастабильных фазовых состояниях;
- теплопередача в энергонапряжённых процессах и повышение надежности в энергетике.

ИТФ УрО РАН является признанным мировым лидером и основателем нового научного направления в исследовании тепловых процессов с фазовой метастабильностью и изучении теплофизических свойств веществ в метастабильных состояниях. Результаты исследований заложили научные основы описания быстрых фазовых превращений в энергетических установках, ракетной и космической технике, лазерных технологиях. Они служат научной базой для разработки методов интенсификации теплообмена в элементах энергетического оборудования, перспективных газогидратных технологий хранения и транспорта природного газа, создания уникальных теплопередающих устройств – контурных тепловых труб, которые сегодня широко используются в космических аппаратах не только России, но и США, стран Европейского Союза, Китая.

Научные подразделения:

- лаборатория фазовых переходов и неравновесных процессов;
- лаборатория быстропротекающих процессов и физики кипения;
- лаборатория криогеники и энергетики;
- лаборатория высокотемпературных измерений;
- лаборатория теплопередающих устройств.

В ИТФ УрО РАН разработаны, созданы и успешно функционируют *уникальные экспериментальные установки* для измерения теплофизических свойств веществ в метастабильных состояниях и исследования быстропротекающих процессов:

- установка для измерения времени жизни перегретых жидкостей;
- установка для изучения нестационарного теплообмена в импульсно перегретых средах;
- установка по импульсному растяжению жидкостей в волне отрицательного давления;
- установка для исследования теплоотдачи от тонких платиновых проволок к эмульсиям с низкокипящей дисперсной фазой;
- установка для изучения акустической кавитации в жидкостях;
- установка для измерения температуры спонтанного вскипания и критических параметров веществ;
- установка для изучения струй вскипающих хладонов;
- установка для локальных измерений температуропроводности металлов;
- установка для изучения электрических и магнитных свойств сверхпроводников;
- установка для исследования свойств газовых гидратов, синтезированных конденсацией молекулярных пучков водно-газовой смеси.

В ИТФ УрО РАН работает 37 научных сотрудников, 1 член–корреспондент РАН, 12 докторов наук и 21 кандидат наук. Пять научных сотрудников являются лауреатами Государственной премии РФ, один – лауреат премии Правительства РФ.

Сотрудники Института читают учебные и специальные курсы в ВУЗах города: теплофизика, молекулярная физика, компьютерное моделирование молекулярных процессов, методы обработки результатов физических измерений, теплотехника, физика неравновесных процессов, современные проблемы физики кинетических явлений.



620016, г. Екатеринбург
ул. Амундсена, 106

Институт электрофизики УрО РАН

Перечень основных научных направлений

Физика высоких плотностей энергии. Проблемы импульсной энергетике. Лазерная физика и нелинейная оптика. Фазовые переходы и электродинамические процессы в конденсированных средах. Методы генерации мощных потоков корпускулярного и электромагнитного излучения.



Директор, чл.-корр. РАН
Шпак Валерий Григорьевич



Лаборатория импульсной техники

Разработка сверхмощных полупроводниковых приборов и силовых генераторов для применения в импульсных наносекундных импульсных генераторах для применения в импульсных ускорителях электронов, рентгеновских аппаратах, устройствах СВЧ-электроники, генераторах сверхширокополосного излучения, газовых лазерах и экологических технологиях.

Лаборатория электронных ускорителей

Разработка малогабаритных наносекундных генераторов с напряжением в сотни киловольт и энергией импульса в единицы джоулей. При длительности импульсов 2-5 нс они обеспечивают пиковые мощности 10^8 - 10^9 Вт при частоте повторения импульсов 10-100 Гц.



Лаборатория пучков частиц

Разработка источников с холодным катодом, генерирующих пучки ионов газов. Нанесение покрытий методом ионной имплантации.



Лаборатория нелинейной динамики плазмы

Нелинейные процессы в неидеальной плазме. Нелинейная динамика вихревых структур в плотной плазме. Нелинейная динамика контактных и свободных границ сплошных сред в сильных электрических и магнитных полях.

Лаборатория низкотемпературной плазмы

Изучение процессов в низкотемпературной плазме, создаваемой в газовых смесях различного состава импульсными электронными пучками.



Лаборатория импульсных источников излучения

Импульсные и постоянные источники рентгеновского излучения. Создание компактной импульсной наносекундной рентгеновской техники с цифровым и пленочным выводом изображения.

Лаборатория физической электроники

Изучение физики электрического разряда в вакууме

Лаборатория импульсных процессов

Получение слабоагрегированных нанопорошков методом электрического взрыва проволоки.

Лаборатория физики диэлектриков

Изучение поведения конденсированных диэлектриков, твердых и жидких, при воздействии предельных электрических полей наносекундной длительности, а также быстротекущие физические процессы, сопутствующие такому воздействию.

Лаборатория прикладной электродинамики

Магнитно-импульсное прессование нанопорошков. Синтез керамики с тонкой микроструктурой. Разработка твердо-оксидных топливных элементов.



Лаборатория квантовой электроники

Получение слабоагрегированных нанопорошков и тонких пленок методом лазерной абляции. Изучение импульсной катодолуминесценции твердых тел.

Лаборатория теоретической физики

Теория электронных и магнитных свойств неупорядоченных систем. Фазовые переходы. Теория сверхпроводимости. Электроны в сильно коррелированных системах.

Лаборатория нелинейной оптики

Исследование взаимодействия поляризации света и его траектории (спин-орбитальное взаимодействие фотона).





Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

www.urfu.ru

Крупнейший (более 50 тысяч студентов и пяти тысяч преподавателей) из федеральных вузов России. Создан указом Президента РФ 2 апреля 2010 г. на базе Уральских технического (УГТУ-УПИ) и классического (УрГУ) университетов. Ректор УрФУ — В.А.Кокшаров. Структура университета насчитывает больше 20 институтов и факультетов.

Институт естественных наук УрФУ (ИЕН) включает в себя 3 департамента: «Физический факультет», «Химический факультет» и «Биологический факультет». Главный девиз Института – **«Образование на все времена!»**.



Директор института – кандидат физико-математических наук Владимир Венедиктович Кружаев (v.v.kruzhaev@urfu.ru)
Объединение трех факультетов усилило интеграцию научных лабораторий и центров. ИЕН – безоговорочный лидер среди институтов УрФУ по объему научных исследований и по числу статей.

Основные партнёры ИЕН:

Институты УрО РАН в рамках специализированных научно-образовательных центров, Институт прикладной астрономии РАН, Пулковская астрономическая обсерватория, Государственный астрономический институт им. П.К. Штернберга, Институт общей физики РАН, Физический институт РАН, Специальная астрофизическая обсерватория РАН, Пушчинская радиоастрономическая обсерватория Физического института РАН. Совместные научные исследования проводятся с учёными десятков университетов из топ-200 мировых рейтингов.

ИЕН – это не только учебный процесс и исследовательская деятельность, но и интересное общение со своими сверстниками, преподавателями, а также разнообразная и многоцветная студенческая жизнь с вечеринками, спортивными соревнованиями и культурными развлечениями.



Тезисы докладов
XIII Всероссийской школы-семинара
по проблемам физики конденсированного состояния вещества
г. Екатеринбург, 7–14 ноября 2012 г.

Материалы школы-семинара
публикуются в авторской редакции

Ответственные за выпуск — Н.Н. Гапонцева, З.Н. Волкова.
Дизайн обложки — П.А. Агзамова, фото на обложке — А.С. Шкварин, Е.Г. Шкварина
Отпечатано на ризографе ИФМ УрО РАН
Заказ № 53. Тираж 300 экз. Усл.-печ. л. 11, 6.

ИФМ УрО РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
тел. (343) 374-02-30, факс (343) 374-52-44
E-mail: physics@imp.uran.ru