Институт физики металлов УрО РАН Институт теплофизики УрО РАН Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина Проводится в рамках междисциплинарного научного форума Moscow Science Week

### ХV ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА-СЕМИНАР ПО ПРОБЛЕМАМ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

# тезисы докладов

13 - 20 ноября 2014 г. Екатеринбург

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



# Тезисы докладов

XV Всероссийская школа—семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС—15)

13-20 ноября 2014 года

г. Екатеринбург 2014 УДК 538.9(043.2) ББК 22.37я431

#### Финансовая поддержка

Российский фонд фундаментальных исследований Фонд некоммерческих программ «Династия» Уральское отделение Российской академии наук Институт физики металлов УрО РАН

#### Оргкомитет

- \* Мостовщикова Елена Викторовна к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (председатель оргкомитета)
- \* Телегин Андрей Владимирович к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя оргкомитета)
- \* Давыдов Денис Игоревич к.т.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя оргкомитета)
- \* Сташкова Людмила Алексеевна к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (учёный секретарь)

#### Программный комитет

- \* Гудин Сергей Анатольевич к.ф.-м.н., ИФМ \* Журавлев А.К., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН УрО РАН (председатель) \* Игошев П.А., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН \* Сташков Алексей Николаевич — к.т.н., ИФМ \* Каменский И.Ю., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН УрО РАН (зам. председателя) \* Кругликов Н.А., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН \* Байтимиров Д.Р., к.ф.–.м.н., УрФУ \* Меренцов А.И., к.ф.-м.н., УрФУ \* Блинова Ю.В., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН \* Пронин А.А., к.ф.-м.н., ИОФ им. Прохорова РАН \* Волкова З.Н., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН \* Саламатов Ю.А., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН \* Волосников Д.В., к.ф.-м.н., ИТФ УрО РАН \* Столбовский А.В. к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН \* Горбачёв И.И., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН \* Ширинкина И.Г., к.т.н., ИФМ УрО РАН \* Гудина С.В., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН \* Шкварин А.С., к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН Локальный комитет
- \* Арапова Ирина Юрьевна к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (председатель)
- \* Агзамова П.А., ИФМ УрО РАН
- \* Андбаева В.Н., ИТФ УрО РАН
- \* Гапонцев В.В., ИФМ УрО РАН
- \* Гапонцева Н.Н., ИФМ УрО РАН
- \* Гапонцева Т.М., ИФМ УрО РАН
- \* Гохфельд Н.В., ИФМ УрО РАН

- \* Ефимова Е.Д., ИФМ УрО РАН
- \* Ефремов А.В., ИФМ УрО РАН
- \* Заяц С.В., ИЭФ УрО РАН
- \* Новикова О.С., ИФМ УрО РАН
- \* Радзивончик Д.И., ИФМ УрО РАН
- \* Хотиенкова М.Н., ИТФ УрО РАН
- \* Шкварина Е.Г., ИФМ УрО РАН

### Содержание

Приветственное слово	1
Вступительная статья	2
Аналитический отчёт о XIV Всероссийской школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-14)	5
Список приглашенных докладов и лекций, прочитанных на СПФКС в 2009–2013 гг.	9
Лекции	15
Квантово–классический кроссовер в окрестности квантовой критической точки, Васин М.Г.	17
Спин-зависимый электронный транспорт в гибридных структурах ферромагнитный металл/полупроводник, <i>Волков Н.В.</i>	18
Управляемый импульсный нагрев жидких сред: от лабораторного стенда до систем мониторинга для энергетиков, фармацевтов и химиков, <i>Волосников Д.В.,</i> <i>Старостин А.А., Скрипов П.В.</i>	19
Механизм интенсивной пластической деформации в свете анализа экспериментальных данных по диффузионным фазовым превращениям в бинарных сплавах, <i>Гапонцев В.Л.</i>	20
Металловедческие исследования уральского «исторического» металла, <i>Гижевский Б.А.</i>	21
Современная магноника, Демокритов С.О.	22
Магнитные наночастицы на основе оксидов железа. Функционализация и биомедицинское применение, <i>Дёмин А.М.</i>	23
Современные методы расчета свойств фрустрированных магнетиков, Журавлев А.К.	24
Кривая намагничивания и физика магнитных явлений, <i>Королев А.В.</i>	25
Глобальные экологические проблемы и направления их преодоления, Медведева И.В.	26
Вода: необычные свойства и значение для жизни и для цивилизации, Медведева И.В.	27
Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия — современный метод исследования электронной структуры твёрдых тел, <i>Меренцов А.И., Шкварин А.С.</i>	28
Магнитокалорический эффект в редкоземельных металлах и их сплавах в области магнитных фазовых переходов, <i>Панкратов Н.Ю.</i>	29
Тонкие пленки мультиферроиков. 10 лет спустя, <i>Пятаков А.П., Звездин А.К., Микаилзаде Ф.А.</i>	30
Введение в фемтосекундную магнитооптику: эксперимент и оборудование, <i>Телегин А.В.</i>	31
Универсальность и квантование тепловыделения в сильнокоррелированных наносистемах, <i>Щелкачев Н.М.</i>	32

Магнитные явления	33
Теоретические исследования резонансной динамики доменных стенок в многослойных ферромагнитных структурах, <i>Абакумова Н.Н., Кудрявцев Р.В., Гумеров А.М., Муртазин Р.Р.</i>	35
Влияние температуры на магнитные и магниторезистивные свойства пленок типа FeNi/FeMn, <i>Аданакова О.А., Горьковенко А.Н., Лепаловский В.Н., Савин П.А., Васьковский В.О.</i>	36
Атомные магнитные моменты в аморфных пленочных структурах <i>R</i> –Co ( <i>R</i> = La, Gd, Tb), <i>Аданакова О.А., Балымов К.Г., Кулеш Н.А., Свалов А.В., Степанова Е.А.,</i> <i>Васьковский В.О.</i>	37
Магнитные свойства соединений редкоземельных металлов, <i>Андреева А.Ю.,</i> <i>Коротаев Е.В., Бушуев М.Б., Сыроквашин М.М.</i>	38
Магнитные и магнитотепловые свойства соединений Mn <sub>0.92</sub> Co <sub>0.98</sub> Ge и Mn <sub>0.8</sub> Co <sub>1.1</sub> Ge, <i>Аникина И.Н., Аникин М.С., Тарасов Е.Н., Осадченко В.Х., Зинин А.В.</i>	39
Аномалии магнитотепловых свойств соединений Ho(Co – Fe) <sub>2</sub> , <i>Аникин М.С., Тарасов Е.Н., Зинин А.В.</i>	40
Магнитоотражение и магнитопропускание халькогенидных шпинелей, <i>Бучкевич А.А., Сухоруков Ю.П., Телегин А.В., Наумов С.В., Федоров В.А., Менщикова Т.К.</i>	41
Магнитные свойства сплавов и ультрадисперсных порошков системы Mn–Al, Волков К.Д., Тарасов Е.Н., Зинин А.В., Андреев С.В.	42
Магнитные свойства Fe–Cr–Co сплавов с содержанием кобальта до 7 масс.%, <i>Вомпе Т.А., Миляев И.М.</i>	43
Исследование резонансного взаимодействия доменных границ с дефектами в модели синус–Гордона, <i>Гумеров А.М., Кудрявцев Р.В., Абакумова Н.Н.</i>	44
Электрические и магнитные свойства сплавов Гейслера $Ni_{50}Mn_{36}Sb_{14-x}Me_x$ (Me = Al, Ge; $x = 0, 1, 2, 3$ ), Емельянова С.М., Марченков В.В., Патраков Е.И., Марченкова Е.Б., Белозерова К.А., Гагарская М.А.	45
Влияние магнитного поля на фазовые переходы в растворах гибкоцепных полимеров, <i>Жернов И.В., Галяс А.Г., Вшивков С.А.</i>	46
Кинетика разрушения парамагнитных центров, образовавшихся при химическом дегидрофторировании поливинилиденфторида, в условиях ограниченного объёма воздуха, <i>Живулин В.Е., Злобина Н.А., Песин Л.А.</i>	47
Халькогениды железа Fe <sub>7</sub> X <sub>8</sub> (X = S, Se): влияние замещения железа титаном и кобальтом на структуру и магнитные свойства, Ибрахим П.Н.Г., Селезнева Н.В., Волегов А.С., Баранов Н.В.	48
Исследование магнитных свойств двухфазных микропроводов при высоких температурах, <i>Иглесиас И., Эл Каммуни Р., Чичай К.А., Родионова В.В., Баскес М.</i>	49
Магнитные свойства и структура нестехиометрических сплавов GdNi <sub>2</sub> Mn <sub>x</sub> , <i>Инишев А.А., Герасимов Е.Г., Мушников Н.В., Терентьев П.Б., Гавико В.С.</i>	50

Измерение намагниченности материалов в сильных магнитных полях при адиабатических условиях, <i>Каманцев А.П., Коледов В.В., Дильмиева Э.Т., Маширов А.В., Шавров В.Г., Е Guillou</i> 51
Магнитные фазовые переходы в сплавах Tm <sub>2</sub> Fe <sub>17-x</sub> Mn <sub>x</sub> , <i>Кучин А.Г., Платонов С.П.,</i> <i>Терентьев П.Б., Королев А.В., Волегов А.С., Габай А.М., Макарова Г.М.</i>
Намагниченность гетероструктур на основе GaAs с низким содержанием марганца, Луговых А.М., Чарикова Т.Б., Окулов В.И., Губкин А.Ф., Моисеев К.Д., Неведомский В.Н., Кудрявцев Ю.А., Галлардо С., Лопес М
Магнитные свойства и ферромагнитный резонанс наночастиц оксида железа и биокомпозитов на их основе, <i>Новоселова Ю.П., Курляндская Г.В., Саматов О.М., Сафронов А.П., Бекетов И.В.</i>
Магнитосопротивление ферромагнитных фаз высокого давления $(GaSb)_2M$ ( $M = Cr, Mn$ ), Пронин А.А., Кондрин М.В
Расчет магнитных свойств сплавов Fe–Al на основе спин–флуктуационного подхода, <i>Радзивончик Д.И., Гребенников В.И.</i>
Солитоны в поле нелинейной волны намагниченности в квазиодномерном ферромагнетике, <i>Киселев В.В., Расковалов А.А.</i>
Исследование магнитной восприимчивости нанокристаллического сплава системы Nd–Fe–B, <i>Сысолятина Л.В., Волегов А.С., Болячкин А.С.</i>
Магнитокалорический эффект в интерметаллидах $Gd_{100-x}Y_x$ ( $x = 015$ ), подвергнутых интенсивной пластической деформации, <i>Ульянов М.Н., Таскаев С.В., Скоков К.П., Карпенков Д.Ю., Ховайло В.В., Батаев Д.С., Пелленен А.П.</i>
Магнитокалорический эффект в интерметаллидах $Gd_{100-x}Zr_x$ ( $x = 03$ ), подвергнутых интенсивной пластической деформации, <i>Ульянов М.Н., Таскаев С.В.,</i> <i>Скоков К.П., Карпенков Д.Ю., Ховайло В.В., Батаев Д.С., Пелленен А.П.</i>
Магнитные свойства низкоразмерных соединений Li <sub>2</sub> Co(WO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> и Li <sub>2</sub> Ni(WO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> , <i>Ушаков А.В., Стрельцов С.В., Мутхуселвам И.П., Санкар Р., Нарсинга Рао Г., Чоу Ф.К.</i> 61
Управление магнитными свойствами и динамикой движения доменной границы в аморфных ферромагнитных микропроводах Co <sub>68.7</sub> Fe <sub>4</sub> Ni <sub>1</sub> B <sub>13</sub> Si <sub>11</sub> Mo <sub>2.3</sub> , <i>Чичай К.А.,</i> <i>Родионова В.В., Жукова В., Ипатов М., Жуков А.</i>
Влияние температуры и времени отжига с приложенными напряжениями на магнитные свойства аморфных ферромагнитных микропроводов, <i>Чичай К.А., Родионова В.В., Жукова В., Ипатов М., Жуков А.</i>
Температурно–зависимые магнитные и структурные свойства микропроводов из сплавов Гейслера Ni–Mn–Ga в стеклянной оболочке, <i>Шевырталов С., Чичай К.А.,</i> <i>Жукова В., Жуков А., Ховайло В.В., Родионова В.В.</i>
Магнитные, магнитотранспортные и структурные свойства тонких пленок Co <sub>2</sub> (Fe, Ti)Ga, <i>Шевырталов С., Родионова В.В., Чичай К.А., Окубо А., Каинума Р.,</i>

#### Уметсу Р.И., Охтсука М., Божко А., Голуб В., Горшенков М., Лянге М., Ховайло В.В. . 65

Фазовые переходы и критические явления	67
Структура и диэлектрические свойства твердых растворов системы $Na_{1-x}Li_xNbO_3$ ( $0 \le x \le 0.14$ , $\Delta x = 0.01$ ) в области криогенных температур, <i>Болдырев Н.А.,</i> <i>Павленко А.В., Кубрин С.П.</i>	. 69
Динамическая неоднородность переохлажденной жидкости с точки зрения калибровочной теории стеклования, <i>Васин М.Г.</i>	. 70
Модель для описания эволюции карбонитридных выделений нескольких составов в сталях с учётом возможности образования новых частиц, <i>Горбачёв И.И.,</i> <i>Пасынков А.Ю</i> .	. 71
Численное исследование неравновесного критического поведения ультратонких ферромагнитных пленок, <i>Елин А.С., Прудников П.В.</i>	. 72
Термодинамическая модель двойных сплавов с изоморфными решетками компонентов и промежуточной сигма–фазой, <i>Ефимова Е.Д., Русаков Г.М.</i>	. 73
ТЭДС графита и смесей графита с оксидом циркония при давлениях от 6 до 44 ГПа, <i>Жарков А.В., Тихомирова Г.В.</i>	. 74
Вязкость и кристаллизация квазикристаллообразующих расплавов Al–Cu–Fe, <i>Камаева Л.В., Ладьянов В.И.</i>	. 75
Размерные эффекты в критических свойствах многослойных ферромагнетиков, Меньшикова М.А., Прудников П.В.	. 76
Эволюция микроструктуры и механических свойств сплава Cu–47ат.%Pd в процессе атомного упорядочения после ИПД прокаткой, <i>Новикова О.С., Антонова О.В., Волков А.Ю.</i>	. 77
Прогнозирование размеров аустенитного зерна на основе моделирования эволюции карбонитридных выделений в сталях, <i>Пасынков А.Ю., Горбачёв И.И.</i>	. 78
Возможность получения новых фаз в графите при холодном сжатии, Петросян Т.К., Кузнецов Д.К., Тихомирова Г.В.	. 79
Схема теплового насоса, основанного на фазовом переходе ферромагнетик– антиферромагнетик в сплавах железо–родий, индуцированного давлением, <i>Родионов В.В., Родионова В.В., Аннаоразов М.П.</i>	. 80
Конкуренция атомных масштабов как механизм образования квазикристаллической фазы, <i>Рыльцев Р.Е., Клумов Б.А., Щелкачев Н.М.</i>	. 81
Реологические свойства системы гидроксипропилцеллюлоза–этиленгликоль в магнитном поле, <i>Солиман Т.С., Галяс А.Г., Вшивков С.А.</i>	. 82
Микроскопическая динамика жидкого галлия, Тахавиев И.Д., Хуснутдинов Р.М.	. 83
Кристаллическая структура и фазовый переход в EuBaCo <sub>2-x</sub> O <sub>6-<math>\delta</math></sub> ( $x = 0; 0.1$ ), <i>Телегин С.В., Наумов С.В., Резницких О.Г.</i>	. 84
Электрические свойства AgFeSbS <sub>3</sub> при экстремальных воздействиях, <i>Хейфец О.Л.,</i> <i>Нугаева Л.Л., Тебеньков А.В., Шакиров Э.Ф., Мельникова Н.В., Филиппов А.Л.</i>	. 85

Влияние давлений и низких температур на электрические свойства AgGeSbS <sub>0.9</sub> Se <sub>2.1</sub> , <i>Хейфец О.Л., Мельникова Н.В., Бабушкин А.Н., Нугаева Л.Л., Тебеньков А.В.</i>	86
Электрические свойства $(PbSe)_x(AgAsSe_2)_{1-x}$ ( $x = 0.2, 0.3$ ), Хейфец О.Л., Мельникова Н.В., Бабушкин А.Н., Нугаева Л.Л.	87
Проводимость и транспортные явления	89
Влияние смешивания анионов на свойства железосодержащих халькогенидных сверхпроводников, <i>Абухасва А.С., Меренцов А.И., Селезнева Н.В., Баранов Н.В.</i>	91
Особенности сопротивления в параллельном плоскости гетероструктуры магнитном поле, <i>Боголюбский А.С., Неверов В.Н., Гудина С.В., Клепикова А.С.</i>	92
Измерение коэффициентов диффузии дейтерия в протонных проводниках при помощи методики NRAOL (анализ ядерными реакциями «онлайн»), <i>Выходец В.Б., Курённых Т.Е., Нефёдова О.А., Обухов С.И., Выходец Е.В.</i>	93
Аномальные гальваномагнитные эффекты в селениде ртути с примесями 3 <i>d</i> - переходных металлов, <i>Дерюшкин В.В., Бобин С.Б., Окулов В.И., Лончаков А.Т.,</i> <i>Говоркова Т.Е.</i>	94
Влияние высоких давлений на электро– и магнитосопротивление $(InSe)_x(CuAsSe_2)_{1-x}, x = 0.05, Зайкова В.Е., Мельникова Н.В., Курочка К.В$	95
Скейлинг в режиме квантового эффекта Холла в гетероструктуре <i>n</i> –InGaAs/GaAs с одиночной квантовой ямой, <i>Клепикова А.С., Неверов В.Н., Шелушинина Н.Г.,</i> <i>Арапов Ю.Г., Гудина С.В., Якунин М.В.</i>	96
Ионная проводимость керамических фаз на основе сложных оксидов сурьмы, Лупицкая Ю.А., Новикова В.Ф., Филоненко Е.М.	97
Влияние замещения титана ванадием на электрические свойства CaCu <sub>3</sub> Ti <sub>4</sub> O <sub>12</sub> , <i>Мирзорахимов А.А., Мельникова Н.В., Кадырова Н.И., Устинова И.</i>	98
Анализ кинетики тока в наноструктурированных полупроводниках в рамках модели электронного транспорта, <i>Сибатов Р.Т., Морозова Е.В.</i>	99
Зонная структура и электрические характеристики диодных <i>n</i> <sup>+</sup> –SiGe/Si/ <i>p</i> –SiGe гетероструктур в условиях интенсивной засветки короткой Si базы оптическими импульсами, <i>Орлов М.Л., Орлов Л.К.</i>	100
Влияние легирования на изменение симметрии спаривания электронно- легированного сверхпроводника Nd <sub>2-x</sub> Ce <sub>x</sub> CuO <sub>4+δ</sub> вблизи границы антиферромагнитной фазы, <i>Петухова О.Е., Чарикова Т.Б., Шелушинина Н.Г.,</i> <i>Петухов Д.С., Иванов А.А.</i>	101
Температурная зависимость коэффициента Холла в электронно–легированных сверхпроводниках вблизи границы сверхпроводящей и антиферромагнитной фазы, Петухов Д.С., Чарикова Т.Б., Шелушинина Н.Г., Харус Г.И., Петухова О.Е., Иванов А.А.	102
Квантовый эффект Холла в гетероструктурах на основе теллурида ртути, Попов М.Р., Арапов Ю.Г., Гудина С.В., Неверов В.Н., Шелушинина Н.Г., Якунин М.В.	103

Электропроводность, коэффициент Зеебека и их зависимость от содержания кислорода, парциального давления кислорода и температуры для YBaCo <sub>2</sub> O <sub>6-δ</sub> , <i>Седнев А.Л., Цветов Д.С.</i>
Структура и ионная проводимость церата бария, допированного редкоземельными металлами, <i>Филоненко Е.М., Лупицкая Ю.А.</i>
Влияние способа синтеза на морфологию и диэлектрические свойства материалов, <i>Яковлева Е., Чупахина Т.И., Мельникова Н.В.</i>
Резонансные явления 107
Радиопоглощающие материалы на основе антисегнето–, сегнетоэлектрических композиций, <i>Абубакаров А.Г.</i>
Магнитные сверхтонкие взаимодействия на ядре <sup>51</sup> V в пирохлоре Lu <sub>2</sub> V <sub>2</sub> O <sub>7</sub> , <i>Агзамова П.А., Петров В.П., Чернышёв В.А., Никифоров А.Е., Назипов Д.В.</i>
Локализация ионов лития в оксиде Li <sub>2</sub> HfO <sub>3</sub> по данным ЯМР <sup>6,7</sup> Li, <i>Арапова И.Ю.,</i> Бузлуков А.Л., Верховский С.В., Геращенко А.П., Михалев К.Н., Бакланова Я.В., Денисова Т.А.
Неоднородное магнитное состояние Sr <sub>1-x</sub> La <sub>x</sub> MnO <sub>3</sub> : ЯМР <sup>55</sup> Mn, <i>Волкова З.Н.,</i> <i>Голдырева Е.И., Михалев К.Н., Гермов А.Ю.</i>
ЯМР <sup>17</sup> О в манганитах со слабым электронным допированием, <i>Волкова З.Н.,</i> Голдырева Е.И., Михалев К.Н., Якубовский А.Ю
Исследование решеточной динамики в монокристаллах SiC с различным изотопным составом методом ЯМР, <i>Гермов А.Ю., Верховский С.В., Якубовский А.Ю., Волкова З.Н.</i> 114
Нелинейные диссипативные моды в цепочках и двумерных решётках металлических наночастиц, <i>Носков Р.Е., Смирнова Д.А.</i>
Фазированная наноантенна с автоперестраиваемой индикатриссой рассеяния, <i>Носков Р.Е., Лапшина Н.С.</i>
Исследование туннельно–связанных двойных ям на основе SiGe/Si методами фотолюминесценции и вертикального транспорта, <i>Бекин Н.А., Жукавин Р.Х., Лобанов Д.Н., Орлов М.Л., Шастин В.Н., Юрасов Д.В., Яблонский А.Н.</i>
Анализ влияния угла сдвига фаз на колебательные процессы в тонкостенном цилиндре, нагруженном динамическим потоком жидкости, <i>Писарев П.В.,</i> <i>Модорский В.Я.</i>
Численный анализ вибраций лопаток центробежного насоса нагруженных потоком жидкости, Писарев Р.В., Писарев П.В
Захват в авторезонанс при наличии шума, <i>Султанов О.А.</i>
Структурные и механические свойства твёрдых тел 121
Получение пленок Ba–Sr–Nb–O (BSN) при помощи разряда с убегающими электронами

Свойства и состав наночастиц, полученных при распылении керамических мишеней в плазме емкостного ВЧ разряда, <i>Алихаджиев С.Х.</i>
Структура и свойства массивного MgB <sub>2</sub> после деформации в наковальнях Бриджмена, <i>Акшенцев Ю.Н., Дегтярев М.В., Пилюгин В.П., Криницина Т.П., Кузнецова Е.И.,</i> <i>Блинова Ю.В., Сударева С.В.</i>
Структурные изменения в поликристаллическом магнии после мегапластической деформации (сдвиг под давлением), <i>Власова А.М., Гринберг Б.А., Пилюгин В.П.</i> 126
Оптимальные режимы деформации и облучения молибдена для получения однородной субмикрокристаллической структуры, Гапонцева Т.М., Махинько Ф.Ф., Чащухина Т.И., Воронова Л.М., Гущина Н.В., Пилюгин В.П., Овчинников В.В., Дегтярев М.В.
Особенности структуры атомноупорядочивающегося сплава Cu <sub>3</sub> Pd, образовавшейся в результате деформационно–термического воздействия, <i>Гохфельд Н.В.,</i> <i>Буйнова Л.Н., Пилюгин В.П., Пушин В.Г.</i>
Изменение магнитных свойств сплавов на основе Ni <sub>3</sub> Al после деформации, <i>Давыдов Д.И.</i>
Исследование формирования тонкой структуры модельных сталей во время механического сплавления и при отжигах, <i>Елькин И.А., Волков В.А., Чулкина А.А.</i> .130
К вопросу об измерении микротвердости покрытий методом индентирования, <i>Кайгородов А.С., Мамаев А.С.</i>
Кристаллическая структура фульмината серебра, <i>Ковалев Е.В., Кравченко Н.Г.,</i> Поплавной А.С
Анализ болида над Кольским полуостровом 19 апреля 2014 года и поиск его фрагментов, <i>Кругликов Н.А., Грицевич М., Гроховский В.И., Когоут Т., Халода Дж.,</i> <i>Лейтинен Е.</i>
Структура и свойства никеля, наноструктурированного интенсивной пластической деформацией, <i>Кузнецов Д.Д., Столбовский А.В., Попов В.В., Попова Е.Н., Пилюгин В.П., Рачёва Е.А.</i>
Влияние режимов термомеханической обработки на текстуру и магнитострикцию сплава Fe <sub>86</sub> Ga <sub>14</sub> , <i>Милютин В.А., Гервасьева И.В.</i>
Концентрационные неоднородности в прутках титановых сплавов, выявленные с помощью сертификационной процедуры «голубого травления», <i>Выходец В.Б., Курённых Т.Е., Обухов С.И.</i>
Методика измерений акустических свойств наноматериалов, <i>Перевозчикова Ю.А., Бунтов Е.А., Зацепин А.Ф.</i>
Акустические свойства и упругие константы нанокерамики Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , <i>Перевозчикова Ю.А., Бунтов Е.А., Зацепин А.Ф.</i>
Прогнозирование остаточных напряжений упругопластического деформированного твердого тела, <i>Песин М.В., Макаров В.Ф.</i>

Анализ напряженно–деформированного состояния профильнои коническои поверхности в трехмерной постановке, <i>Песин М.В.</i>
Динамика решетки редкоземельных титанатов со структурой пирохлора $R_2$ Ti <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ( $R = $ Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu): <i>ab initio</i> расчет, <i>Петров В.П., Чернышёв В.А.,</i> <i>Никифоров А.Е.</i>
Структурные превращения в сплавах $R(Fe_{1-x}Co_x)_2$ под действием спонтанно поглощенного водорода, <i>Сташкова Л.А., Гавико В.С., Мушников Н.В., Терентьев П.Б.</i> 142
Схлопывание толстой стальной цилиндрической оболочки под действием взрыва, Зельдович В.И., Фролова Н.Ю., Хейфец А.Э., Шорохов Е.В., Долгих С.М., Гаан К.В. 143
Неразрушающий контроль 145
Особенности накопления и термовысвечивания дозиметрической информации детекторами ТЛД–500 при высокодозном облучении, <i>Абашев Р.М., Сюрдо А.И., Мильман И.И., Власов М.И.</i>
Скользящая рентгеновская дифракция в кристалле с приповерхностными дефектами, <i>Голентус И.Э., Гаевский А.Ю.</i>
Определение фазового состава аустенитных коррозионностойких сталей, <i>Корх М.К.,</i> <i>Ригмант М.Б., Ничипурук А.П.</i>
Акустическая визуализация процессов разрушения мартенситно–стареющей стали ЧС–5ВИ, подвергнутой пластической деформации, <i>Корх Ю.В., Сташков А.Н.</i> 150
Применение метода акустической микроскопии для исследования тонких пленок, <i>Корх Ю.В., Владимиров А.Б.</i>
Экспериментальная оценка критических полей смещающихся доменных границ на образцах из низкоуглеродистой стали после воздействия пластической леформации. <i>Ничипурук А.П., Огнева М.С., Сташков А.Н.</i>
Синхротронное излучение в России и за рубежом. Пряничников С.В
Влияние кобальта на твердость и магнитные свойства мартенситно–стареющих сталей, <i>Сташков А.Н., Сомова В.М., Сажина Е.Ю., Сташкова Л.А., Огнева М.С.</i> 154
Теплофизика 155
Manuumanuumanuumanuum addaum a cuemana กลอยเกลยอยังสามบุญแบบ และสมบุ ก

Магнитогипертермичесн	кий эффект в	системе взаи	имодействующих	частиц в	
осциллирующем магн	итном поле, <i>Зуба</i>	рев А.Ю, Абубан	кр А.Ф		.157
Ячейка для измерения по <i>Андбаева В.Н., Хотиен</i>	оверхностного на кова М.Н.	лтяжения раство	эров водорода и ег	го изотопов,	.158
Теплоперенос в силь тепловыделении. Экси	но неидеальны териментальный	іх растворах подход, <i>Галкин</i>	при мощном 1 Д.А., Скрипов П.Н	локальном 3	.159

О температурной зависимости поверхностной свободной энергии в области переохлажденных состояний однокомпонентной жидкости, *Гришина К.А.* .......160

Исследование теплообмена многокомпонентных жидкостей при импульсном нагреве, Лукьянов К.В., Котов А.Н., Старостин А.А
Температура достижимого перегрева и предельные растяжения растворов этан–азот, <i>Панков А.С.</i>
Изучение температурной зависимости теплофизических свойств полимерных материалов методом управляемого импульсного нагрева, <i>Старостин А.А., Ямпольский А.Д., Смотрицкий А.А.</i>
Активационный барьер кристаллизации: молекулярно–динамический эксперимент, <i>Бобров К.С., Типеев А.О.</i>
Поверхностное натяжение раствора пропан–гелий, Хотиенкова М.Н., Гришина К.А165
Определение концентраций и ортобарических плотностей растворов метан– азот–гелий в интервале температур 105–160 К, <i>Хотиенкова М.Н., Андбаева В.Н.,</i> <i>Гришина К.А.</i>
Электрофизика 167
Динамика расплавленного металла в катодном пятне вакуумной дуги, Гашков М.А., Зубарев Н.М., Кочурин Е.А
Получение и обработка алюминиевого металломатричного композита методами сильноточной электроники, <i>Заяц С.В., Кайгородов А.С., Паранин С.Н., Томило В.А., Кривонос Ю.И., Кебец А.В.</i>
Исследование кольцевых взрывоэмиссионных катодов, <i>Комарский А.А., Чепусов А.С.,</i> <i>Кузнецов В.Л., Корженевский С.Р., Бессонова В.А., Криницин В.В.</i>
Формирование областей с высокой плотностью энергии электрического поля на свободной поверхности жидкого диэлектрика в результате взаимодействия нелинейных волн, <i>Кочурин Е.А., Зубарев Н.М., Гашков М.А.</i>
Синтез наночастиц оксидов металлов в канале ускорителя плазмы, Портнов Д.С., Багазеев А.В., Бекетов И.В., Азаркевич Е.И., Медведев А.И., Мурзакаев А.М
Термодинамическое описание жидкого металла при интенсивном импульсном энерговводе, <i>Волков Н.Б., Чингина Е.А.</i>
Наноматериалы 175
Структурные изменения поверхности поликристаллического алюминия, Алероев М.А., Крымшокалова Д.А., Ашхотова И.Б., Ашхотов О.Г
Влияние β–облучения на люминесцентные свойства субмикронной керамики оксида алюминия, <i>Ананченко Д.В., Киряков А.Н., Звонарев С.В., Кортов В.С.</i>
Эффективность прессования нанопорошков по схемам Z– и Θ–пинчей, <i>Болтачев Г.Ш.,</i> Волков Н.Б., Чингина Е.А
Взаимосвязь микро– и макросвойств оксидных наноразмерных порошков применительно к процессам холодного компактирования, <i>Болтачев Г.Ш.,</i> <i>Кочурин Е.А., Максименко А.Л., Штерн М.Б.</i>

Термодинамика высококонцентрированных феррожидкостей в отсутствие внешнего магнитного поля, <i>Втулкина Е.Д., Елфимова Е.А.</i>
Зависимость геометрических характеристик нанотубулярного слоя TiO <sub>2</sub> от времени анодирования во фторсодержащем растворе этиленгликоля, <i>Дорошева И.Б.,</i> <i>Камалов Р.В., Вохминцев А.С., Валеева А.А., Вайнштейн И.А., Ремпель А.А.</i>
Сенсор ацетона на основе тонких плёнок SnO <sub>2</sub> , модифицированных благородными металлами, <i>Дробот А.В., Рудов Ф.В.</i>
Вычисление свободной энергии и давления в магнитной жидкости с учётом Ван–дер– Ваальсова взаимодействия. Данные теоретических вычислений и компьютерного моделирования, <i>Елфимова Е.А., Турышева Е.В.</i>
Влияние влажности на электрические и газочувствительные характеристики сенсоров паров ацетона, <i>Золотарёва Г.Р., Рудов Ф.В.</i>
Зернограничная диффузия в наноструктурных материалах для случая мгновенного источника диффузанта, <i>Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Ломаев И.Л.</i>
Импульсная катодолюминесценция наноструктурной керамики оксида алюминия при различных режимах синтеза, <i>Киряков А.Н., Ананченко Д.В., Звонарев С.В.,</i> <i>Кортов В.С.</i>
Получение нанотрубок анодированного ZrO <sub>2</sub> в электролитах на основе водных растворов этиленгликоля, <i>Кожевина А.В., Камалов Р.В., Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А.</i>
Начальная стадия механического сплавления в бинарной системе на основе Cr с Fe, <i>Колодкин Д.А., Елсуков Е.П., Ульянов А.Л., Порсев В.Е.</i>
Исследование аналитических характеристик вольтамперометрических сенсоров на основе многостенных углеродных нанотрубок, <i>Косых А.С., Малахова Н.А.,</i> <i>Сараева С.Ю., Колядина Л.И., Вохминцев А.С., Ищенко А.В., Вайнштейн И.А.</i> 190
Влияние наноструктуры на фотолюминесценцию оксида алюминия, <i>Лукманова А.М., Кортов В.С., Звонарев С.В.</i>
Синтез интерметаллических тонких пленок при отжиге бинарных металлических тонкопленочных систем, <i>Макрушина А.Н., Плотников В.А., Макаров С.В.</i>
Зарядовые состояния катионов в наноструктурированных кобальтитах GdBaCo <sub>2</sub> O <sub>5.5</sub> , исследованные методом рентгеновской абсорбционной спектроскопии, <i>Месилов В.В., Галахов В.Р., Шамин С.Н., Гижевский Б.А., Наумов С.В., Телегин С.В.</i> 193
Процессы кристаллизации в тонких пленках сплава типа Finemet, <i>Михалицына Е.А.,</i> <i>Катаев В.А., Лепаловский В.Н., Курляндская Г.В.</i>
Парные корреляции в бидисперсной магнитной жидкости в отсутствии внешнего магнитного поля, <i>Нехорошкова Ю.Е., Елфимова Е.А.</i>
Низкотемпературная теплоемкость разупорядоченных углеродных нанотрубок, Пономарев А.Н., Бобенко Н.Г., Егорушкин В.Е., Мельникова Н.В

Электронное и пространственное строение слоистых дисульфидов хрома-меди СиСт, "V.S. по данным рентгеновской, рентгеноэлектронной спектроскопии
и квантово–химических расчетов, <i>Коротаев Е.В., Перегудова Н.Н., Канажевский В.В.,</i> <i>Пичугин А.Ю., Сыроквашин М.М., Андреева А.Ю.</i>
Исследование полос, обусловленных рекомбинацией двумерного электронного газа в спектрах фотолюминесценции AlGaN/GaN гетероструктур при высоком уровне
Алгоритм исправления рентгеновских фотоэлектронных спектров на аппаратное уширение, <i>Саламатов Ю.А., Шакирова Г.Д., Грибов И.В.</i>
Определение спинового момента 3 <i>d</i> -элементов с использованием Кα рентгеновских эмиссионных спектров, <i>Свяжин А.Д., Галахов В.Р., Гижевский Б.А., Курмаев Э.З.,</i> Шамин С.Н
Энергетическая структура иона неодима в моноклинном оксиде иттрия, <i>Торопова П.В., Спирина А.В.</i>
Люминесцентные свойства нановискеров нитрида алюминия, <i>Чайкин Д.В.,</i> Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А., Афонин Ю.Д.
Рентгеноспектральное исследование диселенида титана, интеркалированного железом и марганцем, Шкварин А.С., Меренцов А.И., Можчиль Р.Н., Воробьёва Н.С., Титов А.Н
Отражение и прохождение электромагнитной волны в тонких двухслойных металл– диэлектрических пленках при наклонном падении, <i>Щелкунов Н.М.</i>
Термо– и оптически стимулированная люминесценция SrF <sub>2</sub> с редкоземельными активаторами, <i>Ягодин В.В., Ищенко А.В., Шульгин Б.В.</i>

#### Теория конденсированного состояния

Влияние упругой анизотропии на теплопроводность монокристаллических
нанопленок и нанопроводов при низких температурах, <i>Бахарев С.М., Кулеев И.Г.,</i>
<i>Кулеев И.И.</i>
Влияние модифицирующих стёкол на свойства твёрдых растворов системы $NaNbO_3-$
LiNbO <sub>3</sub> , <i>Вербенко И.А.</i>
Анализ активационных процессов в переохлажденных модельных стеклах,
Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В
Влияние высоких давлений на электронную структуру и транспортные свойства европия, <i>Гапонцев В.В., Морозова Н.В., Овсянников С.В., Щенников В.В.</i>
Скошенное спиральное магнитное упорядочение в слоистых системах, Гильмутдинов В.Ф., Тимиргазин М.А., Аржников А.К
Кристаллическая структура бромида серебра, <i>Гимаев А.В.</i>
Фононный спектр эльпасолитов Cs <sub>2</sub> NaYbF <sub>6</sub> и Cs <sub>2</sub> NaYF <sub>6</sub> : <i>ab initio</i> pacчет,
Закирьянов Д.О., Чернышёв В.А

Авторский указатель 251
Изучение температурных свойств фибриллярного α–кератина методом электронного парамагнитного резонанса, <i>Мишинкина Е.А., Байтимиров Д.Р., Конев С.Ф.,</i> Исакова К.Е., Деветьяров К.А., Черепанова Е.А.
Динамическая спекл–интерферометрия как метод изучения метаболизма клеток с вирусом герпеса, <i>Владимиров А.П., Михайлова Ю.А., Малыгин А.С., Бородин Е.М.,</i> <i>Бахарев А.А., Порываева А.П.</i>
биофизика 947
Исследование влияния величины поправки на двойной учет корреляционных эффектов на решение молели Эмери Якудов Э.О. Павлов Н.С. Некрасов И.А. 246
Исследование интерфейсов многослойных структур Co/Cu методом ядерного магнитного резонанса, <i>Чупраков С.А., Банникова Н.С., Блинов И.В.</i>
Конкуренция зарядового и спинового упорядочения в модельном купрате, <i>Чиков А.А., Аввакумов И.Л., Москвин А.С.</i>
Фазовая картина, зёренный ландшафт, диэлектрические и теплофизические свойства феррита висмута с добавками тербия, <i>Хасбулатов С.В.</i>
Численное моделирование теплообменных процессов в термоэлектрическом преобразователе энергии, <i>Писарев П.В., Федоровцев Д.И.</i>
Спинодаль растянутого кристалла: теоретический расчет и компьютерный эксперимент, <i>Типеев А.О.</i>
Зависимость поверхности Ферми монослоя FeSe от параметров кристаллической структуры, <i>Слободчиков А.А., Некрасов И.А.</i>
Расчет характеристик ряда взрывчатых веществ, Празян Т.Л
Структура и энтропийные характеристики упорядочения квазикристаллических систем, <i>Полянский Д.А., Михалюк А.Н., Титов П.Л.</i>
Определение ориентационной связи между структурными составляющими эвтектоида сплава U – 1.5%Мо, <i>Кабанова И.Г., Клюкина М.Ф., Сагарадзе В.В.,</i> <i>Печеркина Н.Л., Зуев Ю.Н.</i>
Магнитные фазовые диаграммы и переход металл–диэлектрик в <i>t–t'</i> модели Хаббарда для кубических решеток при учете электронных корреляций и спиральных магнитных состояний, <i>Игошев П.А., Тимиргазин М.А., Гильмутдинов В.Ф.,</i> <i>Аржников А.К., Ирхин В.Ю.</i>

#### Приветственное слово

#### Дорогие коллеги!

Поздравляю вас с тем, что мы встретились на Всероссийской школе–семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества уже в пятнадцатый раз! У нас юбилей! Ура! Могли ли те несколько молодых сотрудников Института физики металлов, родивших идею собираться и обсуждать интересующие их вопросы по физике твердого тела, подумать, что их встречи превратятся в такое серьезное мероприятие...? Я думаю, что они об этом, как минимум, мечтали. Но, впрочем, вы можете их об этом спросить сами. Некоторые из них сейчас среди организаторов СПФКС–15.

Что такое СПФКС? Недавно мой восьмилетний сын задал мне этот вопрос. Ему я ответила просто: «Это большое собрание ученых, которые встречаются и рассказывают друг другу, что нового они изобрели». Конечно, это упрощенный ответ, но суть его верна: СПФКС — это большая научная встреча, которую мы организуем для того, чтобы здесь могли встретиться специалисты, которые только начинают свой научный путь (студенты, аспиранты), и те, кто уже достиг больших вершин и готов поделиться своими знаниями. СПФКС — это большая научная площадка, на которой происходит активное общение, обучение, обмен опытом, налаживание новых научных связей, строятся новые планы и многое, многое другое.

Приятно и волнительно, что мне доверили такое ответственное дело — возглавить Оргкомитет нынешней, пятнадцатой по счету Всероссийской школы–семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества. Люди, работающие в Оргкомитете — настоящие фанаты СПФКС, уже много лет посвятившие этому делу. И мы очень рады, что нам удается собираться четырнадцать лет подряд. Однако, то, что СПФКС есть — это заслуга не только организаторов. Наша Школа–семинар живет и развивается в первую очередь благодаря тому, что ваше активное участие из года в год подтверждает важность и необходимость этих научных встреч.

Дорогие участники! От всей души хочу пожелать: получайте не только пользу, но и удовольствие от времени, проведенного на нашей Школе! Ведь нет ничего хуже, чем сожаление о потраченном впустую времени. Оргкомитет, в свою очередь, будет стараться сделать все от него зависящее, чтобы в следующем году вам вновь захотелось принять участие в СПФКС и привести с собой своих коллег.

Председатель оргкомитета СПФКС–15, к.ф.–м.н., Е.В. Мостовщикова

#### ВСТУПИТЕЛЬНАЯ СТАТЬЯ

«Мы все–таки мудреем год от года …» В.С. Высоцкий, песня «Случай на таможне»

С каждым прожитым годом время от окончания одной СПФКС до начала следующей субъективно сокращается. С юбилейной, десятой, Школы–семинара прошло пять лет, а кажется, что это было совсем недавно. Оргкомитет СПФКС взрослеет, большая часть его или перешагнула 35–летний рубеж, или вплотную к нему приблизилась. Надеюсь, годы прибавляют нам мудрости, но не забирают юношеский энтузиазм и задор. Научные исследования — специфическая отрасль трудовой деятельности, в которой невозможно успешно трудиться без повышения своей квалификации, без постоянного расширения научного кругозора. Учиться приходится буквально до ухода на заслуженный отдых. Поэтому СПФКС как Школа остается востребованной для ученых любого возраста.

СПФКС–15 является юбилейной Школой, а юбилей подразумевает подведение каких-то итогов и построение планов на будущее. Планы, в связи с наступившей реорганизацией РАН и всеобщей неопределенностью, строить достаточно сложно. Конечно, оргкомитет Школысеминара приложит все усилия, чтобы СПФКС продолжила свое существование, чтобы она росла и развивалась. В том же, что не зависит от нас, остается надеяться на лучшее. Пять прошедших лет были достаточно бурными. Хотя костяк оргкомитета за эту пятилетку практически не изменился, у Школы сменилось 4 председателя оргкомитета: Гудин С.А. (СПФКС–10), Арапова И.Ю. (СПФКС–11), Телегин А.В. (СПФКС–12 — СПФКС–14), Мостовщикова Е.В. (СПФКС–15). Они взвалили на свои плечи огромную работу по организации Школы, достойно проводя мероприятия.

На СПФКС–10 в 2009 году пришелся пик количества докладов участников — 246, но развивающийся в стране и в мире экономический кризис отразился и на науке, в связи с чем с каждым последующим годом число докладов участников уменьшалось, достигнув минимума в 2011 г. — 155 (падение на 37%; см. рис. 1.)



Рис. 1. Число участников и докладов на СПФКС.

Затем, по–видимому, экономическая ситуация в стране начала улучшаться. В прошлом году, на СПФКС–14, был достигнут новый максимум количества сделанных докладов — 273, и количество участников в 2013 г. приблизилось вплотную к максимуму 2009 года (305 человек). В этом году ситуация примерно соответствует уровню 2012 года.

На стоимости проживания на Школе–семинаре кризисы, как оказалось, никак не отражались, все эти годы ее рост был практически линейным (рис. 2). Оргкомитет всячески старается сделать доступным для молодежи участие в Школе. Так за все годы проведения у очных участников не брался публикационный взнос, всем участникам предоставлялась скидка на проживание (определяемая уровнем финансирования Школы). Более 5 лет удается договариваться с администрацией УрФУ о дополнительной финансовой поддержке поездок на Школу студентов и аспирантов из университета.



Рис. 2. Стоимость проживания 1 человека.

Вышеупомянутое рекордное количество участников на юбилейной Школе (307 человек) заставило нас при подведении итогов СПФКС–10 задуматься: а к чему мы стремимся? Оргкомитет поставил тогда перед собой задачу, развивать Школу не только количественно (экстенсивно), но и качественно (интенсивно), повышая как научный уровень членов оргкомитета, так и научный уровень ее участников. Но как Школе расти в научном плане? Я упомяну здесь следующие наши действия: усиленное рецензирование присланных тезисов, особый формат теоретической секции, приближающий ее к семинару (увеличенное количество времени на вопросы к докладу), проведение конкурсов студенческих докладов.

Школа растет и развивается. Так, по итогам СПФКС–14 был проведен конкурс на публикацию избранных докладов в виде статей. Отобранные статьи, прошедшие рецензирование, были изданы в 2014 году в журнале «Известия РАН. Серия физическая» т. 78, №8. (Рецензенты подошли к порученному им делу очень ответственно. Например, автор одной из изданных статей сказала мне, что за предыдущий год ею были опубликованы три статьи в трех разных журналах, и замечаний у рецензентов этих трех журналов было значительно меньше.)

Я уже упоминал, что одна из изюминок нашего мероприятия — тщательное рецензирование присланных тезисов докладов. СПФКС — это, прежде всего, Школа, где учатся не только на лекциях известных ученых, но и при написании своих тезисов.

О том, что наши усилия не пропадают даром, можно судить по графикам на рис. 3, отражающим квалификационный уровень участников. Число студентов — участников Школы — после СПФКС–10 остается примерно постоянным, в то время как число аспирантов и кандидатов наук растет. Так, по сравнению с СПФКС–10, число кандидатов наук выросло с 41 до 72, число аспирантов — с 88 до 135.



Рис. 3. Количество кандидатов наук, аспирантов, студентов, принявших участие в СПФКС в разные годы.

Председатель оргкомитета СПФКС—15, Елена Мостовщикова, в своей вступительной статье «Приветственное слово» к этому сборнику пишет об организаторах первых СПФКС: «*Некоторые из них сейчас среди нас, организаторов СПФКС-15*». Все три идейных вдохновителя создания конференции работают в оргкомитете: «*Идея организации выездного молодежного семинара по физике конденсированного состояния вещества появилась в декабре 2000 года у трех молодых сотрудников Института физики металлов (ИФМ) УрО РАН — Поповой (Гудиной) С.В., Кругликова Н.А., Гудина С.А.» [Тезисы докладов СПФКС-10]. Из 28 участников СПФКС-1 организаторами следующих Школ были: Блинова Ю.В., Гапонцев А.В., Гудин С.А., Каменский И.Ю., Кобелев В.Л., Кругликов Н.А., Неверов В.Н., Немченко А.В., Попова С.В., Ряжкин А.В., Ширинкина И.Г. Посмотреть, кто из этих «некоторых» входит сейчас в оргкомитет, я предлагаю вам самостоятельно, поискав их в списке членов оргкомитета СПФКС-15.* 

Закончить статью я хотел бы традиционно, написав цели, поставленные перед молодежной Школой–семинаром, и поблагодарив всех, кто приложил руку к организации этого «Дела» — Школы–семинара СПФКС. СПАСИБО ВАМ!

#### Цели, поставленные перед молодежной Школой-семинаром:

1) обучение участников, повышение их профессионального уровня, расширение научного кругозора;

2) объединение молодежи, создание нового круга общения, установление научных связей;

3) приобретение опыта научного общения, участия и организации конференций;

4) создание определенного психологического климата, помогающего молодым участникам лучше раскрыть свои личность и талант, почувствовать свою научную значимость.

> Председатель оргкомитета Школысеминара СПФКС-2 — СПФКС-10, к.ф.-м.н. С.А. Гудин

#### Аналитический отчёт о XIV Всероссийской школе–семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС–14)

#### 1. Общая статистическая информация

XIV Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС–14) проводилась с 20 по 26 ноября 2013 г. на б/о «Трубник» в с. Курганово Свердловской области. Основными организаторами СПФКС–14 являлись Институт физики металлов УрО РАН (большинство членов оргкомитета — молодые сотрудники ИФМ УрО РАН), Институт теплофизики УрО РАН, Институт электрофизики УрО РАН и Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина. Школа-семинар проводилась при финансовой поддержке РФФИ, Уральского отделения РАН, Фонда некоммерческих программ «Династия» и УрФУ. В 2013 г. школа-семинар была посвящена памяти академика А.М. Ильина (1932–2013 гг.), который принимал активное участие в становлении и работе СПФКС.

СПФКС проводится в формате научной конференции с элементами образовательной направленности. Подавляющее большинство участников СПФКС-14 составили 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 актуальным 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 305 человек из более 28 городов РФ, представляющих более 40 научных и образовательных учреждений, а также 3 человека из стран СНГ и один приглашенный докладчик из-за рубежа — профессор университета г. Мюнстера, Германия. Свои доклады представили: 1 академик РАН и 1 член-корреспондент РАН, 14 докторов наук, 72 кандидата наук, 187 молодых учёных без степени (в том числе 52 студента и 84 аспиранта). Всего в ходе проведения школысеминара было сделано (согласно сборнику тезисов и фактической программе конференции) 273 доклада, в том числе лекций (приглашенных докладов) — 27, устных докладов (кратких сообщений) — 78, стендовых докладов — 106. По итогам конференции был проведен конкурс студенческих докладов, а также организован конкурс на публикацию избранных докладов в виде статей в журнале «Известия РАН. Серия физическая».

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 1–4, все значения приведены согласно фактической программе конференции и сборнику тезисов докладов). Дополнительная информация, включающая научную программу, а также видеозаписи лекций и фотоархивы СПФКС–14 и предыдущих конференций, размещена в сети Интернет на сайте Совета молодых ученых ИФМ УрО РАН по адресу http://smu.imp.uran.ru.

Год	всего	лекций	устных	стендовых	заочников
2007	77	19 (24.7%)	39 (50.6%)	19 (24.7%)	н/д
2008	176	19 (10.8%)	73 (41.5%)	49 (27.8%)	35 (19.9%)
2009	244	27 (11.1%)	83 (34.0%)	119 (48.8%)	15 (6.1%)
2010	206	24 (11.7%)	63 (30.6%)	95 (46.1%)	24 (11.7%)
2011	155	19 (12%)	46 (29.3%)	55 (35%)	35 (22.3%)
2012	231	27 (11.7%)	73 (31.6%)	86 (37.2%)	42 (18.2%)
2013	273	27 (10%)	78 (28.6%)	106 (38.8%)	62 (22.7%)

Таблица 1. Категории докладов.

#### Таблица 2. Персональный состав докладчиков.

Год	PAH	Докторов	Кандидатов	Аспирантов+б/с	Студентов
2007	3 (4%)	5 (6%)	22 (29%)	34 (44%)	13 (17%)
2008	3 (1.7%)	5 (2.8%)	35 (19.9%)	85 (48.3%)	48 (27.3%)
2009	3 (1.2%)	8 (3.3%)	41 (16.8%)	88 (36.1%)	82 (33.6%)
2010	3 (1.5%)	12 (5.8%)	31 (15%)	119 (58%)	40 (19.4%)
2011	2 (1.3%)	11 (7%)	25 (16%)	85 (54%)	32 (20.4%)
2012	4 (1.7%)	17 (7.4%)	51 (22.1%)	117 (50.6%)	43 (18.6%)
2013	2 (1%)	14 (5.1%)	72 (26.4%)	135 (49.5%)	52 (19%)

Таблица 3. Географический состав докладчиков (города + организации).

Год	ИФМ	ИТФ	ИЭФ	УрФУ	ЧГУ	Россия	СНГ	Е–бург
2007	33 (43%)	6 (8%)	н/д	25 (32%)	н/д	8 (10%)	н/д	69 (90%)
2008	41 (23%)	12 (7%)	н/д	31 (18%)	8 (4.5%)	70 (40%)	4 (2.3%)	94 (53.4%)
2009	59 (24%)	15 (6%)	12 (5%)	53 (22%)	13 (5%)	78 (32%)	3 (1.2%)	150 (61%)
2010	52 (25%)	14 (7%)	8 (4%)	51 (25%)	5 (2.4%)	76 (37%)	3 (1.5%)	127 (61%)
2011	51 (32%)	11 (7%)	3 (2%)	39 (25%)	2 (1.3%)	50 (32%)	2 (1.3%)	105 (67%)
2012	71 (31%)	15 (7%)	8 (3.5%)	41 (18%)	2 (0.9%)	86 (37%)	2 (0.9%)	144 (62%)
2013	67 (25%)	12 (5%)	8 (3%)	73 (27%)	5 (2%)	99 (36%)	4 (1.5%)	173 (61%)

Как следует из данных таблиц 1–3, в 2013 году общее количество участников заметно (на 15–20%) увеличилось по сравнению с предыдущими конференциями и достигло своего исторического максимума. Поскольку значительную часть (около 29% от общего числа) составили устные доклады, было принято решение сгруппировать теоретические доклады в параллельную секцию (см. программу конференции), чтобы не перегружать рабочий график и не вводить искусственные ограничения по времени при условии сохранения общей продолжительности мероприятия (6 полных дней). Последний фактор также лимитирует общее количество приглашенных докладов (лекций), которое в 2013 г. не изменилось по сравнению с предыдущим годом, в то же время количество стендовых докладов в абсолютном выражении увеличилось примерно пропорционально общему количеству участников. Другой интересный момент — рекордное число докладчиков — кандидатов наук (72 человека), что может быть связано как с целевой грантовой поддержкой РФФИ для молодых кандидатов наук (конкурс «Мой первый грант РФФИ»), так и с ростом популярности и высоким научным авторитетом школы–семинара.

Еще одна важная тенденция касается географического распределения докладчиков: на протяжении последних 5 лет только около 2/3 докладов сделаны жителями Екатеринбурга (в это число входят иногородние студенты и аспиранты, обучающиеся в г. Екатеринбурге), в то время как более 1/3 составляют иногородние участники (99 человек в 2013 г., что также

является «историческим рекордом» СПФКС–14). Среди институтов УрО РАН традиционное первое место по численности занимают сотрудники ИФМ (в этом году их относительное количество немного уменьшилось вследствие общего роста количества участников, хотя в последние 5 лет конференцию стабильно посещают 50–70 человек из ИФМ). Также заметное количество докладов (в сумме около 8%) было представлено молодыми специалистами из ИТФ и ИЭФ УрО РАН.

Большая часть участников конференции (около 70–80% в последние 6 лет) является молодыми учеными без степени, аспирантами и студентами. В 2013 г. почти треть докладов (73 человека) была представлена учащимися и сотрудниками Уральского федерального университета благодаря улучшению взаимодействия оргкомитета с администрацией университета и наличием дополнительной финансовой поддержки со стороны УрФУ.

#### 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.

Название секции	2010	2011	2012	2013
Магнитные явления	34 (16.5%)	27 (17.2%)	48 (20.8%)	52 (19%)
Фазовые переходы и крит. явления	29 (14.1%)	18 (11.5%)	19 (8.2%)	31 (11.4%)
Проводимость и транспорт	13 (6.3%)	10 (6.4%)	19 (8.2%)	25 (9.2%)
Оптика и спектроскопия	13 (6.3%)	11 (7%)	21 (9.1%)	20 (7.3%)
Резонансные явления	10 (4.9%)	6 (3.8%)	7 (3%)	9 (3.3%)
Физика низких температур	6 (2.9%)	2 (1.3%)	5 (2.2%)	5 (1.8%)
Структурные и механические св-ва	35 (17.0%)	23 (14.6%)	36 (15.6%)	34 (12.5%)
Неразрушающий контроль	5 (2.4%)	7 (4.5%)	12 (5.2%)	8 (2.9%)
Теплофизические свойства веществ	18 (8.7%)	16 (10.2%)	21 (9.1%)	21 (7.7%)
Электрофизика	8 (3.9%)	5 (3.2%)	6 (2.6%)	10 (3.7%)
Наноматериалы	27 (13.1%)	19 (12.1%)	25 (10.8%)	41 (15%)
Биофизика	3 (1.5%)	5 (3.2%)	4 (1.7%)	12 (4.4%)

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

Как следует из таблицы 4, популярность секций «Магнитные явления», «Наноматериалы» и «Структурные и механические свойства твёрдых тел» на СПФКС заметно превосходит остальные направления, что, по–видимому, связано в первую очередь с преобладанием данной тематики как в ИФМ, так и в других организациях уральского региона. В 2013 г. количество докладов по магнетизму составило почти пятую часть от их общего количества, процентное соотношение докладов по наноматериалам заметно увеличилось по сравнению с прошлым годом, а по материаловедческим направлениям (структура и неразрушающий контроль), наоборот, несколько уменьшилось. Как и на предыдущих конференциях, была проведена отдельная сессия по теплофизике (в основном участники из ИТФ УрО РАН, 7.7% от общего количества докладов). Также было представлено заметное количество докладов по фазовым переходам и критическим явлениям (11.4%), оптике и спектроскопии (7.3%) и проводимости и транспортным явлениям (9.2%). Отметим, что все эти научные направления были широко представлены и на предыдущих конференциях СПФКС.

Большинство представленных на конференции докладов направлены на решение наиболее актуальных, с точки зрения мировой науки, проблем физики конденсированных сред и вполне соответствуют мировому уровню исследований по указанным выше тематикам, некоторые из них ведутся по проектам с участием как отечественных, так и зарубежных специалистов. С лекциями и приглашенными докладами выступили академик РАН В.В. Устинов, член–корреспондент РАН Н.В. Мушников, профессор университета Мюнстера С. Демокритов, а также ведущие научные сотрудники Уральского отделения и других институтов РАН: М.Г. Васин, А.П. Носов, А.П. Танкеев, К.Н. Михалев, и другие. Предсказуемый интерес участников вызвал также доклад В.И. Гроховского, посвященный уникальному событию, вызвавшему широкий резонанс в мировой прессе, — падению метеорита «Челябинск» и его исследованиям.

Анализируя степень взаимного соответствия проблематики докладов, поддержанных РФ-ФИ, и перечня упомянутых выше актуальных проблем физики конденсированного состояния вещества, можно отметить следующее. Грантами РФФИ в 2013 г. было поддержано 43.6% от общего количества докладов, в несколько меньшем количестве докладов (38.1%) указаны другие источники финансирования, а суммарное количество имеющих финансовую поддержку работ составило 65.6%. Таким образом, можно отметить тенденцию к относительному увеличению финансирования исследований по представленным на СПФКС тематикам по сравнению с предыдущими годами (соответствующие показатели за 2011 и 2012 гг. равны 30 и 40%, 34 и 35%, 53 и 56%).

По наиболее широко представленным на конференции тематикам относительный уровень поддержки РФФИ выглядит следующим образом: магнитные явления — 52% докладов имеют поддержку РФФИ, 37% — другие гранты (в прошлом году соответственно 42 и 27%); наноматериалы — 44% имеют поддержку РФФИ, 41% — другие гранты (в 2012 г. соответственно 36 и 32%). В третьей по относительной численности секции «Структурные и механические свойства твёрдых тел» грантами РФФИ поддержано 18% докладов (другими грантами — 44%). Из этого можно сделать вывод, что РФФИ оказывает значительную поддержку научной активности по наиболее актуальным проблемам современной физики конденсированного состояния вещества.

#### Заключение

На заключительном заседании участники конференции и члены оргкомитета в своих выступлениях отмечали увеличение числа интересных докладов и их высокий научный уровень, высокое качество оформления презентаций и отличную организацию научных сессий.

По итогам проведения СПФКС–14 было принято решение о проведении следующей, пятнадцатой всероссийской школы–семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества в 2014 г.

> Отчёт составлен: А.А. Прониным, под редакцией: С.А. Гудина, А.В. Телегина, Л.А. Сташковой

#### Список приглашенных докладов и лекций, прочитанных на СПФКС в 2009–2013 гг.

#### СПФКС-10, 9-15 ноября 2009 г.

- 1. Устинов В.В. «Наноспинтроника»
- 2. Мушников Н.В. «Оборудование центров колективного пользования институтов УрО РАН»
- 3. Танкеев А.П. «Нелинейные структуры в конденсированных средах: рождение и эволюция»
- 4. Казаков А.Ф. «Теплофизические свойства в эпоху глобальных информационных систем: сбор, оценка, моделирование, и доставка информации»
- 5. Скрипов П.В. «Опыты с перегретой жидкостью (памяти академика В.П. Скрипова)»
- 6. Трахтенберг И.Ш. «Свойства покрытий, содержащих углегодную алмазоподобную компоненту»
- 7. Ермаков А.Е. «Нанотехнологии для техники и медицины»
- 8. Титов А.Н. «Принципы формирования композитных материалов на основе интеркалатов дихалькогенидов титана»
- 9. Максимов В.И. «Дифракция тепловых нейтронов как метод для изучения механических напряжений в твёрдых телах»
- 10. Пискунов Ю.В. «Ядерный магнитный резонанс как метод исследования вещества»
- 11. Дружинин А.В. «Что такое показатель преломления?»
- 12. Иванов А.О. «Магнитные нанодисперсные жидкости»
- 13. Орлов Л.К. «Особенности и перспективы использования вакуумной гидридной технологии при выращивании квантовых Si–SiGe гетероструктур»
- 14. Таскаев С.В. «Применение магнитокалорического эффекта при конструировании термодинамических устройств»
- 15. Садовский М.В. «Многозонность ключ к высокотемпературной сверхпроводимости в арсенидах железа»
- 16. Счастливцев В.М. «Развитие физического материаловедения в лицах»
- 17. Пилюгин В.П. «Достижения и проблемы современной физики высоких давлений»
- 18. Кудряшова О.В. «Интегродифференциальные уравнения электростатики и магнитостатики»
- 19. Дерягина И.Л. «Атомно–силовая микроскопия как метод фрактографии керамических материалов»
- 20. Орлов И.О. «Современные эксперименты физики высоких энергий»
- 21. Гудин С.А. «магнитные наноструктуры Fe/Cr/Fe»
- 22. Пронин А.А. «Диэлектрическая спектроскопия глицерина в условиях высокого давления»
- 23. Подгорных С.М. «О Теплоемкости твердых тел: классические и квантовые представления, современные проблемы теории и эксперимента»
- 24. Арапов Ю.Г. «Квантовый спиновый эффект Холла в нулевом магнитном поле (обзор)»
- 25. Михалев К.Н. «Ядерный магнитный резонанс в сильнокоррелированных оксидах»
- 26. Васьковский В.О. «Гигантский магнитный импеданс и его практическое применение»
- 27. Береснев С.А. «О глобальных климатических изменениях»
- 28. Журавлёв А.К. «Что такое близорукость? и что с ней можно сделать?»

СПФКС-11, 15-21 ноября 2010 г.

- 1. Садовский М.В. «Электронная структура, сверхпроводимость и возможное псевдощелевое поведение в пниктидах железа»
- 2. Мушников Н.В. «Постоянные магниты: физика, технологии, применение»
- 3. Ремпель А.А. «Размерные эффекты на свойствах наноматериалов»
- 4. Садовский М.В. «ЭПР–75»
- 5. Скоков В.Н. «Флуктуации с 1/f-спектром мощности»
- 6. Майданик Ю.Ф. «Контурные тепловые трубы высокоэффективные теплопередающие устройства для систем терморегулирования»
- 7. Логинов В.Н. «Методика изучения метеоритов»
- 8. Борисевич А.Н. «О некоторых параметрах «глобального» потепления на территории бывшего Советского Союза»
- 9. Пискунов Ю.В. «Ядерный магнитный резонанс как метод исследования вещества»
- 10. Михалев К.Н. «Магнитные оксиды: фазовое расслоение и спиновая динамика по данным ЯМР»
- 11. Комогорцев С.В. «Особенности магнитной микроструктуры аморфных и нанокристаллических ферромагнетиков»
- 12. Кайгородов А.С. «Нанокерамика. Стоит ли овчинка выделки?»
- 13. Иванов А.О. «Математическое моделирование с подвижными межфазными фронтами»
- 14. Васьковский В.О. «Магнетизм и функциональные свойства плёночных структур с аморфными ферримагнитными элементами»
- 15. Мостовщикова Е.В. «Инфракрасная спектроскопия магнитных полупроводников»
- 16. Кожевников Д.Н. «От жидких кристаллов к органическим светодиодам: вчера, сегодня, завтра мониторов»
- 17. Куркин М.И. «О фотонных кристаллах»
- 18. Куркин М.И. «О темной материи»
- 19. Орлова Н.Б. «Сверхбыстрая магнитная динамика: эксперимент и теория»
- 20. Подгорных С.М. «Магнитные измерения на СКВИДе»
- 21. Максимов В.И. «Нейтронный дифрактометр Д7б на исследовательском реакторе ИВВ–2М (г. Заречный): способы сканирования обратного пространства монокристаллов и возможные пути модернизации установки»
- 22. Аврорин Е.Н. «Академик Б.В. Литвинов ученый, конструктор. Научные исследования с помощью ядерных взрывов»
- 23. Дерягина И.Л. «Сверхпроводники на основе  $Nb_3Sn$  от структурных исследований к созданию промышленных проводов»
- 24. Арапов Ю.Г. «Графен: квантовые эффекты вплоть до комнатных температур»
- 25. Кудряшова О.В. «О теоретических задачах магнитной дефектоскопии»

#### Круглые столы:

- 1. Казаков А.Ф. «Теплофизические свойства веществ. База данных NIST»
- 2. Телегин А.В. «Поддержка научной деятельности молодых ученых»

#### **СПФКС-12**, 14–20 ноября 2011 г.

- 1. Счастливцев В.М. «Про академика Садовского В.Д.»
- 2. Ильин А.М. «Нелинейное уравнение диффузии и кольца Лизеганга»
- 3. Дровосеков А.Б. «Исследование межслойного взаимодействия в слоистых магнитных структурах методом ферромагнитного резонанса»
- 4. Титов А.Н. «Наноматериалы на основе интеркалатов»
- 5. Скрипов П.В. «Тепловая проводимость наножидкостей в опытах с мощным тепловыделением»
- 6. Гроховский В.И. «Вещество внеземного происхождения что, где и зачем?»
- 7. Вайнштейн Илья А. «Люминесценция радиационно–чувствительных материалов при термической и оптической стимуляции»
- 8. Щербинин В.Е. «Неразрушающий контроль. Магнитные методы»
- 9. Корзунин Г.С. «Электротехническая сталь как основной магнитный материал»
- 10. Баранов Николай В «Магнитное упорядочение и физические свойства твердых тел»
- 11. Мушников Николай В «Редкоземельные интерметаллиды: магнитные свойства и применения»
- 12. Дегтярев Михаил В «Сдвиг под давлением: мифы и реальность, или научно–методические аспекты изучения материалов, деформированных методом сдвига под давлением»
- 13. Танкеев А.П. «Про Турова Е.А.»
- 14. Михалев К.Н. «ЯМР в магнитных оксидах»
- 15. Титов А.Н. «Дихалькогениды титана как нанореакторы»
- 16. Кругликова С.В. «Как хорошему человеку не дать себя в обиду»
- 17. Миляев М.А. «Спиновые клапаны с эффектом гигантского магнитосопротивления»
- 18. Гламазда Д.В. «Квантовая теория полей движения»
- 19. Куркин М.И. «Нильс Бор»
- 20. Гребенников М.Е. «Идентификация останков по генетическим исследованиям»
- 21. Кузнецова У.О. «Интеллектуальная собственность. Методы защиты ИС»

#### Круглые столы:

- 1. Кумков С.И. «Обработка зашумленных экспериментальных данных с помощью методов интервального анализа»
- 2. Волегов А.С. «Проведение магнитных измерений на SQUID-магнитометре»

#### **СПФКС-13**, 7–14 ноября 2012 г.

- 1. Щербинин В.Е. «Развитие магнитных методов неразрушающего контроля»
- 2. Курмаев Э.З. «Роль Сергея Анатольевича Немнонова в развитии методов рентгеновской спектроскопии на урале»
- 3. Дружинин А.В. «Про Павла Акимовича Халилеева»
- 4. Мухамедшин И.Р. «Натриевые кобальтаты между ВПТС и фрустрированными магнетиками»
- 5. Ильин А.П. «Энергетика наночастиц и нанопорошков»
- 6. Чернов А.А. «Кристаллизация и кавитация переохлажденных расплавов»

- 7. Волосников Д.В, Артемьев Г.А. «Технологии получения современных лекарственных препаратов: органический синтез и датчики контроля»
- 8. Скрипов П.В. «Свойства сверхкритических флюидов (к 150-летию Б.Б. Голицына)»
- 9. Реутов Ю.Я. «Намагничивание ферромагнитных изделий в переменных магнитных полях»
- 10. Гапонцев А.В. «Внутритрубная магнитная диагностика»
- 11. Шкварин А.С. «Рентгеновская спектроскопия: принципы и применение»
- 12. Кузнецов М.В. «Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, дифракция и голография как методы изучения поверхности твердых тел»
- 13. Пилюгин В.П. «Поведение вещества в условиях экстремального действия высоких давлений и температур»
- 14. Гижевский Б.А. «Влияние ударных волн на состав и физико–химические свойства оксидов.ММоделирование планетарных процессов»
- 15. Михалев К.Н. «ЯМР в манганитах»
- 16. Николаев Н.Н. «Проверки фундаментальных симметрий на ускорителях: поиск эдм заряженных частич и легких ядер»
- 17. Максимов В.И. «Нейтронографические установки реактора ИВВ-2М»
- 18. Щелкачев Н.М. «Неравновесная кинетика электронной жидкости: фермионная и бозонная температуры»
- 19. Шалаева Е.В. «Просвечивающая электронная микроскопия и методы анализа электронной дифракции в исследовании структурно–фазовых превращений в неорганических соединениях и сплавах»
- 20. Яландин М.И. «Мощные электромагнитные импульсы»
- 21. Соломонов В.И. «Импульсная катодолюминесценция твердых тел»
- 22. Дерягина И.Л. «Прикладная сверхпроводимость: сверхпроводящие материалы для проекта ИТЭР»
- 23. Васин М.Г. «Калибровочная теория стеклования»
- 24. Садовский М.В. «Про Виталия Лазаревича Гинзбурга»

#### Круглый стол:

- 1. Меренцов А.И., Шкварин А.С. «Синхротронное излучение»
- 2. Давыдов Д.А. «Принципы подготовки заявок на получение грантов»

#### **СПФКС-14**, 20–26 ноября 2013 г.

- 1. Устинов В.В. «Наноспинтроника»
- 2. Носов А.П «Наногетероструктуры спинтроники и мультиферроики»
- 3. Калякин Л.А. «Академик РАН Ильин Арлен Михайлович»
- 4. Дружинин А.В. «Магнетооптическая спектроскопия»
- 5. Васин М.Г. «Критическая динамика фазовых переходов в квази-неэргодических системах»
- 6. Титов А.Н. «Эффект Кондо»
- 7. Дёмин А.М. «Методы получения мультимодальных наносистем на основе магнитных наночастиц и их применение в медицине, биологии, химии»
- 8. Титова С.Г. «Структурный анализ порошковых дифракционных данных»
- 9. Калякин Л.А. «Об устойчивости резонансных процессов относительно шума»

- 10. Решетников А.В. «О струях вскипающих жидкостей»
- 11. Гроховский В.И. «Метеорит Челябинск. Хроника и природа»
- 12. Журавлев А.К. «Метод моделирования спин-решеточной динамики при конечных температурах»
- 13. Танкеев А.П. «Солитоника, магноника и ядерный магнитный резонанс»
- 14. Мушников Н.В. «Индуцированные магнитным полем фазовые переходы»
- 15. Демокритов C.O. «Control of magnetic dynamics by pure spin current»
- 16. Губкин А.Ф. «Возможности метода порошковой дифракции нейтронов для исследования особенностей кристаллической структуры и магнитных явлений»
- 17. Мочалов В.В. «Знаем ли мы, что такое спин протона?»
- 18. Гижевский Б.А. «Электронная структура наноструктурированных оксидов 3*d*–элементов: оптические и рентгеноспектральные подходы»
- 19. Соковнин С.Ю. «Применение импульсных электронных пучков в технологиях»
- 20. Пономарев A.B. «Pulse Power: основы и применении»
- 21. Меренцов А.И. «Халькогениды железа новый виток в истории сверхпроводимости»
- 22. Патраков Е.И. «Основы классических и современных методов химического анализа»
- 23. Кравцов Е.А. «Волны спиновой плотности в тонких пленках и многослойных наноструктурах на основе хрома»
- 24. Стрельцов С.В. «Орбитальные степени свободы и магнетизм в соединениях на основе переходных металлов»
- 25. Гудин С.А. «Механизм колоссального магнитосопротивления для манганитов с активационным типом проводимости»
- 26. Хейфец А.Э. Получение сверхвысоких давлений в металлических материалах с помощью квазисферически сходящихся ударных волн
- 27. Щелкачев Н.М. «Неэрмитова РТ симметричная квантовая механика и неравновесная сверхпроводимость в низкоразмерных наноструктурах»

## Лекции
# Квантово–классический кроссовер в окрестности квантовой критической точки

#### Васин М.Г.

#### Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Россия e-mail: dr vasin@mail.ru

В докладе обсуждается неравновесная динамика критического поведения Бозе–системы, претерпевающей квантовый фазовый переход второго рода. Анализ простейшей системы (скалярная модель Гинзбурга–Ландау) осуществляется с помощью Келдышевской техники неравновесной динамики. Показано, что критическое поведение вблизи квантовой критической точки является мультикритическим, т.е. возможен кроссовер между тремя различными критическими режимами: адиабатическим квантовым режимом, диссипативным классическим режимом (ССDМ) и диссипативным квантовым критической точки непрерывная зависимость критических показателей от температуры представляет собой динамический эффект, сопровождающий кроссовер из ССDM в QCDM. Класс универсальности системы при этом не меняется, а изменение критических показателей при переходит в результате изменения эффективной размерности динамической системы при переходе от тепловых флуктуаций к квантовым флуктуациям.

Работа выполнена при частичной поддержке проектов РФФИ № 13–02–91177 и № 13–02–00579.

1. Vasin M.G., Physica A 415, 533 (2014).

### Спин-зависимый электронный транспорт в гибридных структурах ферромагнитный металл/полупроводник

#### Волков Н.В.

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия e-mail: spfks1@imp.uran.ru

- 1. Полупроводниковая спинтроника. Гибридные структуры ферромагнетик/полупроводник и устройства на их основе. Ожидаемые преимущества использования гибридных структур в спинтронике, проблемы, требующие своего решения.
- 2. Спиновый транспорт в гибридных структурах. Создание спиновой поляризации, управление спиновым состоянием носителей заряда, детектирование спинового тока в полупроводниках. Электрическая спиновая инжекция: неравновесная спиновая поляризация; спиновая аккумуляция; спиновая диффузия. Спиновый транспорт через контакт ферромагнетик/полупроводник (F/S) и структуру ферромагнетик/полупроводник/ферромагнетик (F/S/F). Оптическая ориентация (оптическая спиновая накачка). Резонансные методы создания неравновесных спиновых состояний.
- 3. Устройства на основе гибридных структур. Выбор топологии, многотерминальные планарные устройства. Особенности распространения спин–зависимого тока в структурах с различной топологией. Управление спиновым транспортом в устройствах при помощи магнитного и электрического полей.
- 4. Барьер Шоттки и поверхностные состояния в гибридных структурах. Роль барьера Шоттки и поверхностных состояний в формировании эффектов спин–зависимого электронного транспорта в гибридных структурах. Эффект управляемого смещением гигантского магнитоимпеданса в гибридных структурах с поверхностными состояниями.
- 5. Спин–зависимый транспорт в гибридных структурах в условиях внешних комбинированных воздействий (электрическое и магнитное поле, электромагнитное излучение оптического и СВЧ диапазонов). Гигантский магниторезистивный эффект в гибридных структурах, индуцированный оптическим излучением.

### Управляемый импульсный нагрев жидких сред: от лабораторного стенда до систем мониторинга для энергетиков, фармацевтов и химиков

Волосников Д.В.\*, Старостин А.А., Скрипов П.В.

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: vdv061@bk.ru

В Институте теплофизики УрО РАН для изучения перегретых (относительно температуры равновесия жидкость-пар и/или температуры начала терморазрушения вещества в квазистатическом процессе) состояний жидких сред, в частности для исследования теплообмена в практически важных термонестабильных веществах, был развит метод управляемого импульсного нагрева зонда [1]. В ходе лабораторных исследований было отмечено, что при определенных условиях нагрева существенно возрастает чувствительность метода к изменению начальных условий эксперимента и исходного состава образца. Данное явление связывалось с заходом в область перегретых (относительно устойчивых) состояний и представляло практический интерес в плане решения задач экспресс-термоконтроля состояния жидких сред. Основные этапы работ заключались в моделировании температурновременных условий импульсно нагреваемых веществ, подборе удобных для автоматизации режимов нагрева и реализации соответствующих радиотехнических и аппаратно– программных решений. Таким образом, появилась линейка устройств для обнаружения летучих примесей, в том числе влаги в технологических средах: маслах, топливах, гидравлических жидкостях, компонентах химических реакций.

В ходе практической реализации были получены неожиданные результаты о влиянии следовых количеств влаги (на уровне сотых–тысячных долей %) на теплообмен в термонеустойчивых веществах. В частности, возник вопрос о механизме вскипания обводненного масла и причинах существенной интенсификации теплообмена, которая не может быть объяснена лишь вскипанием присутствующих микроколичеств влаги. Другой вопрос связан с понижением температуры вскипания обводненных низкокипящих веществ при их импульсном нагреве.

В докладе будет представлена история развития и этапы трансформации сугубо лабораторного метода управляемого импульсного нагрева зонда для решения практических задач. Ниже приводится перечень созданных и готовых к практическому применению разработок:

- автономное устройство для оперативного контроля изменения влагосодержания в энергетических маслах с разрешающей способностью  $\sim 10$  ppm [2];
- измерительный комплекс для экспресс-контроля химических превращений в технологических условиях, в частности для мониторинга реакции диазотирования (ключевая реакция для получения лекарственных препаратов нового поколения) [3];
- система мониторинга для оперативного определения влаги в исходных компонентах для производства пластмасс (нефрас и гексен) с разрешающей способностью ~ 5 ppm;
- устройство для сопоставления кратковременной термоустойчивости масел [4].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №13–08–00428\_а) и Уральского отделения РАН (проект №12–2–1–011–АРКТИКА).

- 1. Скрипов П.В., Волосников Д.В., Старостин А.А., Доклады РАН **390**, 2 (2003).
- 2. Шангин В.В., Волосников Д.В., Сафонов В.Н. и др., Приборы 5 (2012).
- 3. Артемьев Г.А., Волосников Д.В., Гурашкин А.Л. и др., Вестник ТГТУ 18, 4 (2012).
- 4. Шангин В.В., Волосников Д.В., Старостин А.А. и др., Тепловые процессы в технике 5, 9 (2012).

### Механизм интенсивной пластической деформации в свете анализа экспериментальных данных по диффузионным фазовым превращениям в бинарных сплавах

#### Гапонцев В.Л.

Российский государственный профессионально-педагогический университет, Екатеринбург, Россия e-mail: vlgap@mail.ru

В лекции рассматривается интенсивная пластическая деформация (ИПД) бинарных сплавов и сопутствующее перераспределение химического состава. Идея анализа основывается на сходстве ИПД и высокотемпературной диффузионной ползучести. В обоих случаях достигаются предельно высокие степени деформации при сохранении сплошности образцов, поэтому оба явления можно рассматривать как проявление сверхпластичности. При диффузионной ползучести сохранение сплошности поликристалла обеспечивается аккомодацией двух мод деформации: диффузии вакансий в объеме зерен и зернограничной диффузии. ИПД происходит при более низких температурах с приложением высоких сжимающих давлений, предотвращающих хрупкое разрушение. При таких температурах основной модой деформации является обмен дислокациями между соседними дисклинациями. Эволюция сетки дисклинаций без нарушения сплошности поликристалла требует присутствия аккомодационных мод. Их роль играют диффузия вакансий в объеме зерен и зернограничная диффузия. В условиях различной подвижности компонент сплава диффузия вакансий приводит к пространственному перераспределению состава, что является характерной особенностью ИПД.

Данные по перераспределению состава при ИПД сплавов дают ключ к её пониманию. Они показывают следующие универсальные закономерности: 1) перераспределение состава приводит к отклонению от состояния равновесия, достигаемого при отжиге сплавов как с отрицательной, так и с положительной энергией смешения; 2) перераспределение состава охватывает весь объем зерен, поэтому оно имеет диффузионный характер; 3) скорость перераспределения состава в ходе ИПД на много порядков превышает скорость диффузии при отжиге; 4) температурные зависимости перераспределения состава при ИПД немонотонны: максимум достигается в области температур 200–300 К. Эти закономерности, а также зависимости размера зерен и фазового состава в сплавах с большой разницей атомных радиусов компонент от среднего состава смеси находят объяснение в рамках описанной выше модели эволюции сетки дисклинаций, контролируемой процессами диффузии [1]. Сопоставление времен перераспределения состава при ИПД и в ходе диффузионого отжига приводит к выводу, что источником вакансий может быть аннигиляция микротрещин, локализованных в узлах сетки дисклинаций [2]. Микротрещины постоянно возникают и исчезают в процессе эволюции этой сетки, что позволяет говорить о сохранении сплошности среды в среднем.

На основе рассмотренной модели дана интерпретация температурно–скоростных режимов ИПД [3] и проведена классификация ИПД бинарных сплавов, учитывающая их термодинамические свойства и соотношение атомных радиусов компонент [1].

- 1. Гапонцев В.Л. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, Екатеринбург (2005).
- 2. Гапонцев В.Л., Колосков В.М., Металловедение и термическая обработка металлов 11, 3 (2007).
- 3. Гапонцев В.Л., Дерягин А.И., Гапонцева Т.М., Физическая мезомеханика 12, 53 (2009).

#### Металловедческие исследования уральского «исторического» металла

#### Гижевский Б.А.

## Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: gizhevskii@imp.uran.ru

Урал известен как крупный центр металлургической промышленности мирового значения. Начиналось всемирное восхождение уральского металла со строительства и пуска в самом начале XVIII века году двух мощных и технически современных по тому времени чугуноплавильных и железоделательных заводов — Каменского и Невьянского. На рубеже XVIII– XIX вв. Россия вышла на первое место в мире по производству черного металла. В это время около 80% российского железа, стали и чугуна производилось на Урале [1]. Представляет общенаучный интерес понимание процессов становления и технической модернизации уральской металлургии как основы развития крупнейшего промышленного региона России. Важным является также оценка свойств и качества уральского исторического металла для объективного сравнения с европейским металлом соответствующего исторического периода и с современным металлом. Для решения этих проблем необходимы современные металловедческие исследования продукции уральских заводов за длительный исторический период.

На протяжении ряда лет в Институте физики металлов УрО РАН под эгидой академика В.М. Счастливцева проводятся исследования структуры, состава и механических свойств чугунных, железных и стальных изделий, произведенных на уральских металлургических заводах в XVIII–XIX веках и начале XX века [2–5]. Результаты этих исследований указывают на весьма высокую чистоту уральского железа и хорошие прочностные свойства уральских железных и стальных образцов, сравнимые с показателями современного металла, имеющего близкое к ним содержание углерода и кремния. Микроструктура образцов исторического металла также близка к данным современных сплавов железа, однако имеет свои особенности, в частности отмечаются неоднородности в макромасштабе, шлаковые включения. Известна также высокая коррозийная стойкость уральского железа, что связано с повышенным содержанием фосфора и меди в уральских рудах и особенностями технологии кричного железа. Каменский завод являлся первенцем уральской доменной металлургии и главным производителем чугунных пушек в России. В докладе будут представлены данные металловедческих исследований продукции Каменского завода и прослежены процессы модернизации металлургического производства этого завода. Будут рассмотрены причины технологических трудностей производства пушек. Высокие показатели уральского исторического металла обеспечивались, прежде всего, отменным качеством используемой руды с большим содержанием железа, высококачественным топливом — древесным углем и, конечно, мастерством уральских металлургов.

Работа выполнена в рамках Программы «Структура» № 01201463331.

- 1. Алексеев В.В., Гаврилов Д.В., Металлургия Урала с древнейших времен до наших дней, М.: Наука (2008).
- 2. Родионов Д.П., Счастливцев В.М., Филиппов Ю.И. 97, 89 (2004).
- 3. Родионов Д.П., Счастливцев В.М., Хлебникова Ю.В., ФММ 108, 105 (2009).
- 4. Счастливцев В.М., Родионов Д.П., Герасимов В.Ю., Хлебникова Ю.В., ФММ 110, 515 (2010).
- 5. Счастливцев В., Родионов Д., Хлебникова Ю., Наука в России №1, 97 (2012).

#### Современная магноника

Демокритов С.О.

## Вестфальский университет им. Вильгельма, Мюнстер, Германия e-mail: omonium@bk.ru

Спинтроника (спиновая электроника) — бурно развивающаяся часть современного магнетизма в течение последних 25 лет оказывает определяющее влияние как на наше понимание процессов переноса в магнитных наносистемах, так и на развитие новых компьютерных технологий. В последние 5–10 лет от спинтроники отделилась новая область исследования — магноника, берущая свое название от магнона — кванта распространяющихся спиновых волн. Главная научная тема магноники это исследование динамических процессов в магнитных наносистемах. В своем докладе я продемонстрирую новые физические эффекты, обнаруженные в магнитных наносистемах, а также проиллюстрирую новые технологические подходы для использования магнонов в передаче и обработке информации, программируемой логике и магнитной памяти.

Данная работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» РК–01201463330 (проект № 12–Т–2–1011) при поддержке Минобрнауки РФ (договоры № 14.Z50.31.0025 и № 14.120.14.1540– НШ).

### Магнитные наночастицы на основе оксидов железа. Функционализация и биомедицинское применение

#### Дёмин А.М.

#### Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: amd2002@mail.ru

В настоящее время в мировой научной литературе появился новый термин «Theranostic nanomedicine» («Theranostics» — производное от thera(ру) (терапия) и (diag)nostics (диагностика), этой теме был посвящён специальный номер журнала Accounts of Chemical Research, 2011, V. 44), что, несомненно, свидетельствует о всё возрастающем интересе исследователей к мультимодальным (мультифункциональным) нанокомпозитам на основе наночастиц различных классов. Всё большее количество разработок в области медицины, биологии, химии связано с использованием новых наноматериалов, характеризующихся высокими магнитными свойствами, в первую очередь на основе железа и его оксидов  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. Особое внимание уделяется суперпарамагнитным наночастицам — магнитные наночастицы (МНЧ) с диаметром менее 20 нм [1]. МНЧ сами по себе могут выступать в роли сигналообразующей метки (при использовании метода МРТ), на них могут быть также иммобилизированы оптические или радиоактивные метки. Кроме того, МНЧ одновременно могут использоваться в качестве платформы для размещения биологически активных веществ или лекарственных средств и молекулярных векторов, обеспечивающих специфичность доставки и удержания препарата в требуемых тканях. На основе МНЧ уже одобрены для клинического использования препараты Ferridex I.V. для визуализации печени и селезенки, ferumoxytol для железо-заместительной терапии и Combidex для визуализации метастаз лимфатического узла.

В настоящее время имеется множество примеров создания нанокомпозитных материалов «coreshell», «yolk-shell» и гетеродимерного типа путём осаждения на поверхности МНЧ квантовых точек или наночастиц благородных металлов. Значительное место в разработке наноматериалов для медицины и биологии занимают МНЧ, модифицированные органическими молекулами. В результате нанокомпозиты приобретают такие свойства, как стабильность в биологических средах (полиэтиленгликоль (ПЭГ) и его производные, биополимеры), специфичность доставки и удержания препарата в тканях (антитела, аптамеры, пептиды) и др. Достаточно часто биомолекулы иммобилизируют на поверхность МНЧ путём непосредственной адсорбции, или используя конденсацию с функционализированными молекулами ПЭГ, то есть за счёт нековалентного связывания. Однако такие нанокомпозиты могут оказаться неустойчивыми в биологической среде и при введении в организм частично или полностью терять свои функциональные свойства.

Более эффективным методом модификации МНЧ считается ковалентное связывание органических молекул с их поверхностью при использовании алкоксисилановых реагентов. В докладе рассмотрены основные методы синтеза МНЧ и их последовательной модификации алкоксисилановыми реагентами, а затем биомолекулами. Приведена оценка их физических свойств, биосовместимости, а также примеры использования в качестве МРТ–контрастных агентов. Описаны другие наиболее перспективные направления использования мультимодальных агентов на основе МНЧ в медицине, биологии и химии.

Работа выполнена при финансовой поддержке УрО РАН (проекты № 12–П–234–2003 и № 12–П–3– 1030), Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 14–03–00146–а), а также в рамках Государственной программы поддержки ведущих научных школ (грант НШ 5505.2012.3). 1. Rosen J.E., Chan L., Shieh D.–B. et al. Nanomed.–Nanotechnol. Biol. Med. **8**, 275 (2012).

### Современные методы расчета свойств фрустрированных магнетиков

#### Журавлев А.К.

## Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: zhuravlev@imp.uran.ru

В обзорной лекции будут рассмотрены следующие темы:

- 1. Как работает метод Монте-Карло (алгоритм Метрополиса) на примере модели Изинга.
- 2. Почему он перестает работать, когда параметры модели таковы, что она является фрустрированной.
- 3. Попытки решить данную проблему в рамках метода Монте-Карло: т.н. репличное Монте-Карло.
- 4. Альтернатива метод трансфер–матрицы; использование для нахождения ее максимального собственного значения методов Ланцоша и DMRG (density–matrix renormalization group).

Работа выполнена при поддержке Проекта Президиума РАН № 12–П–2–1041.

#### Кривая намагничивания и физика магнитных явлений

#### Королев А.В.

## Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: korolyov@imp.uran.ru

В современных документах ВАК (http://teacode.com/online/vak/p01-04-11.html) находим следующий — «Шифр специальности: 01.04.11 Физика магнитных явлений. Формула специальности: Физика магнитных явлений — область науки, занимающаяся изучением: взаимодействий веществ и их структурных элементов (атомов, их ядер, молекул, ионов, электронов), обладающих магнитным моментом, между собой или с внешними магнитными полями; явлений, обусловленных этими взаимодействиями, а также разработкой материалов с заданными магнитными свойствами, приборов и устройств, базирующихся на использовании магнитных материалов и явлений. Области исследований: 1. Разработка теоретических моделей, объясняющих взаимосвязь магнитных свойств веществ с их электронной и атомной структурой, природу их магнитного состояния, характер атомной и доменной магнитных структур, изменение магнитного состояния и магнитных свойств под влиянием различных внешних воздействий. 2. Экспериментальные исследования магнитных свойств и состояний веществ различными методами, установление взаимосвязи этих свойств и состояний с химическим составом и структурным состоянием, выявление закономерностей их изменения под влиянием различных внешних воздействий. 3. Исследование изменений различных физических свойств вещества, связанных с изменением их магнитных состояний и магнитных свойств. 4. Исследование явлений, связанных с взаимодействием различного рода электромагнитных излучений и потоков элементарных частиц с магнитными моментами вещества или его структурных составляющих: атомов, атомных ядер, электронов (парамагнитный, ферромагнитный, ядерный магнитный, ядерный гамма резонансы и др). 5. Разработка различных магнитных материалов, технологических приемов, направленных на улучшение их характеристик, приборов и устройств, основанных на использовании магнитных явлений и материалов. Отрасль наук: технические науки (за разработки приборов, установок, технологических процессов и за их применение в народном хозяйстве); физико-математические науки (за исследования общефизического характера)».

Все сказанное в этом документе существенным образом связано с понятием кривой намагничивания, основы которого были заложены в трудах М. Фарадея. Именно кривая намагничивания исторически являлась и является по настоящее время, как правило, первым, а зачастую главным и даже единственным источником экспериментальной информации, поставляемой в указанную выше область науки, в области исследований и в отрасль науки. В докладе излагаются типичные эксперименты по изучению кривой намагничивания и известные представления, позволяющие понять получаемые результаты и сделать определенные заключения по некоторым пунктам **Области исследований**. Дается анализ новых возможностей использования экспериментальных данных для решения различных вопросов физики магнитных явлений, а также физики конденсированного состояния.

#### Глобальные экологические проблемы и направления их преодоления

#### Медведева И.В.

#### Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия e-mail: ivmed@imp.uran.ru

Рассматриваются основные экологические проблемы на планете Земля:

- рост народонаселения;
- истощение минеральных, топливных, земельных ресурсов;
- ухудшение качества атмосферы, почв, доступности и качества пресной воды;
- образование огромных объемов техногенных и бытовых отходов;
- ущерб здоровью людей, потеря биологического разнообразия и эстетическая деградация поверхности планеты.
- Критически анализируются проблема «Глобального потепления» и проблема отходов.
- Обсуждаются основные направления преодоления экологического кризиса:
- международное сотрудничество;
- экологическое законодательство;
- экологическая политика и экологическая экономика;
- экологизация производства. Экологическое проектирование и управление.

Понятия устойчивого развития и экологической этики.

Новые парадигмы развития общества:

- ресурсосбережение;
- подражание природе;
- отказ от потребительских ценностей.

### Вода: необычные свойства и значение для жизни и для цивилизации

Медведева И.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия e-mail: ivmed@imp.uran.ru

Обсуждается распространенность воды во Вселенной и количество воды на Земле.

Рассмотрены аномальные физико–химические свойства воды: состав, строение, плотность, тепло-

емкость, поверхностное натяжение, фазовые переходы, динамическая структура воды. Критически рассматриваются мифы о «Тайнах воды».

Обсуждается значение воды для жизни и для цивилизации.

Проблемы роста водопотребления и негативное воздействие техносферы на водные ресурсы.

# Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия — современный метод исследования электронной структуры твёрдых тел

Меренцов А.И.<sup>1,2</sup>\*, Шкварин А.С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: alex\_fisik@mail.ru

Исследование электронной структуры твёрдых тел является необходимым шагом при изучении свойств новых материалов. Одним из методов исследования электронной структуры является рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС, XPS, PES). Физической основой метода является внешний фотоэффект. Полусферический электростатический анализатор позволяет сделать развёртку по энергии фотоэлектронов. Для удобства анализа полученных данных по оси энергий спектров откладывается не кинетическая энергия фотоэлектронов, а их энергия связи. Анализ спектров внутренних уровней (core levels) и валентной полосы (valence band) позволяет получить информацию о зарядовом состоянии ионов, входящих в соединение, об их химическом окружении. Обзорный спектр позволяет получить информацию о химическом составе исследуемого соединения. Поскольку методика исключительно поверхностная (глубина выхода фотоэлектронов составляет порядка 10 Å), основной проблемой при подготовке к эксперименту является получение чистой поверхности.

Лабораторные спектрометры позволяют использовать две фиксированные энергии возбуждения, например  $Al_{K\alpha}(E = 1486.7 \text{ >B})$  и  $Mg_{K\alpha}(E = 1253.7 \text{ >B})$ . Источники синхротронного излучения позволяют использовать энергии возбуждения в широком диапазоне. Возможность выбора энергии возбуждения позволяет использовать методику резонансного РФЭС, когда в валентную полосу с последующей ионизацией забрасываются электроны с одного из внутренних уровней. Резонансные спектры позволяют определить парциальный вклад электронных состояний того или иного элемента в области вблизи поверхности Ферми.

Прямым способом наблюдения поверхности Ферми является РФЭС с разрешением по углу (ARPES). Этот метод позволяет детектировать не только энергию фотоэлектронов, но и их импульс, что, в свою очередь, даёт детальную информацию о зонной структуре материала.

В лекции будут затронуты следующие аспекты методики РФЭС:

- 1. История возникновения метода.
- 2. Физические основы метода.
- 3. Особенности подготовки поверхности образца.
- 4. Лабораторные приборы.
- 5. Синхротронные линии для РФЭС.
- 6. Резонансная РФЭС.
- 7. ARPES.

Работа выполнена при финансовой поддержке проектов РФФИ № 14–03–00274 и проекта Президиума УрО РАН № 12–М–23–2010.

# Магнитокалорический эффект в редкоземельных металлах и их сплавах в области магнитных фазовых переходов

#### Панкратов Н.Ю.

## Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия e-mail: pankratov@phys.msu.ru

Магнитокалорический эффект (МКЭ) заключается в выделении или поглощении тепла в магнетике при воздействии на него магнитного поля. Если эти изменения происходят при адиабатических условиях, то это приводит к повышению или понижению температуры образца  $\Delta T_{ad}$ . Повышенный интерес к исследованию МКЭ и воздействию магнитного поля на энтропию различного рода магнетиков в последние годы обусловлен с одной стороны возможностью получения информации о магнитных фазовых переходах, а с другой — перспективой использования ряда из них в магнитных холодильных машинах.

Основным преимуществом твердотельного охлаждения является большая плотность твердого тела по сравнению с плотностью пара или газа в классических парокомпрессионных устройствах. Изменение энтропии на единицу объёма в твердых материалах в 6–8 раз выше, чем в газе, что позволяет резко сократить габариты холодильников при сохранении их холодопроизводительности. Другое преимущество калорических методов охлаждения состоит в их высокой эффективности: это связано с тем, что нагрев и охлаждение являются практически обратимыми термодинамическими циклами, в отличие от процессов сжатия и расширения пара в рабочем цикле парокомпрессионного холодильника. Немаловажным является и то обстоятельство, что твердотельные холодильные машины являются экологически чистыми.

Практическое создание магнитокалорической холодильной машины сталкивается с серьезными техническими трудностями в связи с необходимостью формирования сильных магнитных полей. Однако применение новых материалов и нанокомпозитов в качестве рабочего тела магнитокалорической холодильной машины позволят существенно снизить требуемые величины магнитных полей и, соответственно, улучшить массогабаритные параметры машин.

Непрерывное возрастание интереса к исследованию МКЭ как с точки зрения фундаментальной науки, так и для возможности применения магнитокалорических материалов вызвано открытиями новых соединений, обладающих значительно большим МКЭ, чем те, что в ранее известных соединений. Такими примерами материалов являются: сплавы FeRh, La<sub>0.8</sub>Ca<sub>0.2</sub>MnO<sub>3</sub>, Gd<sub>5</sub>Si<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>, Gd<sub>5</sub>(Si<sub>x</sub>Ge<sub>4-x</sub>), MnAs, MnFeP<sub>0.45</sub>As<sub>0.55</sub>, La(Fe,Si)<sub>13</sub> их гидриды La(Fe,Si)<sub>13</sub>H<sub>y</sub>, а также сплавы с памятью формы Ni–Mn–Ga. Для эффектов, наблюдаемых в данных материалах, было предложено название гигантский МКЭ. Установлено, что гигантский МКЭ возникает при приложении магнитного поля в области магнитоструктурного перехода первого рода. Когда система претерпевает фазовый переход первого рода, температурная зависимость энтропии демонстрирует резкое изменение при критической температуре  $T_{\rm C}$ . Гигантский МКЭ достигается за счет сопутствующего изменения энтропии при структурных преобразованиях. В результате, наблюдается эффект гигантского МКЭ является суммой изменений магнитной энтропии и разница в энтропии двух кристаллографических модификаций вещества.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 13-02-00916.

#### Тонкие пленки мультиферроиков. 10 лет спустя

Пятаков А.П.<sup>1</sup>\*, Звездин А.К.<sup>2</sup>, Микаилзаде Ф.А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия <sup>2</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова, Москва, Россия <sup>3</sup>Институт высоких технологий Гебзе, Гебзе, Турция \*e-mail: pyatakov@physics.msu.ru

Мультиферроики, среды с магнитным и электрическим упорядочением, под именем сегнетомагнетиков известны уже с 1960–х годов [1]. Однако настоящий всплеск интереса к этим объектам возник только после получения тонкопленочных материалов на основе феррита висмута (BiFeO<sub>3</sub>) немногим более 10 лет назад [2,3].



Рис. 1. Спиновая циклоида и соответствующая ей волна спиновой плотности в перпендикулярной плоскости. На вставках показан скос антиферромагнитных подрешеток и результирующий вектор локальной намагниченности в различных точках спиновой циклоиды.

История их исследования драматична и поучительна: вслед за первыми сенсационными результатами, полученными при измерении магнитоэлектрических, сегнетоэлектрических и магнитных свойств пленок BiFeO<sub>3</sub> [2], последовали годы критического анализа, проверки и тщательного исследования свойств и магнитного состояния в тонких пленках [4-8]. Принципиальное значение для магнитных и магнитоэлектрических свойств тонких пленок феррита висмута имело наличие в нем пространственно модулированной спиновой структуры — циклоиды (рис. 1), ее сосуществование с локальным скосом намагниченностей антиферромагнитных подрешеток, обуславливающего слабый ферромагнетизм [4], и условия ее подавления в тонких пленках [8].

Хотя далеко не все свойства тонких пленок феррита висмута, заявленные первоначально в [2], подтвердились (а иные оказались вовсе не исключительным свойством именно тонкопленочной формы материала), в результате повы-

шенного внимания к этим материалам были сделаны открытия, оказавшие влияние не только на развитие исследований в области мультиферроиков, но и в сопредельных областях физики сегнетоэлектрических и полупроводниковых материалов.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 14–02–91374 СТ\_а и частичной поддержке проекта РФФИ № 13–02–12443 офи\_м2.

- 1. Смоленский Г.А. и др. Изв. АН СССР, Сер. Физ. **25**, 1333 (1961).
- 2. Wang J. et al., Science 299, 1719 (2003).
- 3. Звездин А.К., Пятаков А.П., УФН 174, 9 (2004).
- 4. Kadomtseva A.M. et al., Phase Transitions 79, 1019 (2006).
- 5. Мухортов В.М., Головко Ю.И., Юзюк Ю.И., УФН 179, 909 (2009).
- 6. Catalan G., Scott J.F., Adv. Mater. 21, 2463 (2009).
- 7. Пятаков А.П., Звездин А.К., УФН 182, 593 (2012).
- 8. Sando D. et al., Nature materials 12, 641 (2013).

### Введение в фемтосекундную магнитооптику: эксперимент и оборудование

#### Телегин А.В.

## Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: telegin@imp.uran.ru

Обнаружение сверхбыстрого перемагничивания [1] дало надежду для возможного в ближайшем времени многократного увеличения скорости магнитной записи информации и создания новых элементов памяти и типов электронных устройств — сделать еще один шаг к созданию квантовых компьютеров и искусственного разума.

Однако с появлением фемтосекундной магнитооптики в теории магнетизма возникли проблемы с описанием сверхбыстрых процессов оптического размагничивания и перемагничивания в магнитных средах с различной величиной, типом или комбинацией обменного и спин–орбитального взаимодействий [2,3]. Несмотря на уже большое количество экспериментальных и теоретических результатов и отработанную методику «фемтосекундных измерений» [4,5], решение большинства вышеуказанных проблем до сих пор имеет дискуссионный характер [2].

В настоящее время подобные уникальные исследования ведутся всего в нескольких крупных научных группах в мире, поэтому не всегда известны широкой публике, несмотря на потенциальную важность результатов исследований для всех областей знаний. В докладе кратко описаны основные физические принципы генерации фемтосекундных импульсов, узлы лабораторных установок, способы измерения длительности и параметров ультракоротких импульсов, возможные пути их использования в оптической спектроскопии, кратко изложены основные проблемы фемтосекундной магнитооптики и приведен ряд примеров практического использования фемтосекундной техники — для широкого круга слушателей.

Работа выполнена в рамках госзадания «СПИН» РК–01201463330 при частичной поддержке программы ОФН РАН № 12-Т-2-1005 и программы Минобразования РФ (мегагрант № 2013–220–04–329).

1. Oiwa A., Mitsumoro Y., Morya R., Slupinski T., Munekata H., Phys. Rev. Lett. 15, 137202 (2002).

2. Kirilyuk A., Kimel A., Rasing T., Rev. Mod. Phys. 82 (2010).

3. Koopmans B., van Kampen M., Kohlhepp J.T., de Jonge W.J.M., J. of Applied Physics 87, 9 (2000).

4. Caffrey A., Norris Pamela M., Stevens Robert J. et al., Review of Scientific Instruments 74, 1 (2003).

5. Козлов С.А., Самарцев В.В., Основы фемтосекундной оптики, М.:Физматлит (2009).

#### Универсальность и квантование тепловыделения в сильнокоррелированных наносистемах

Щелкачев Н.М.

## Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия e-mail: nms@itp.ac.ru



Рис. 1. Цепочка слабосвязанных наногранул. При неупругом котуннелировании электроны оставляют после себя в гранулах электрон–дырочные (e-h) пары, последующий распад которых приводит к нагреву гранулы. Один из основных вопросов современной наноэлектроники и физики наносистем — контроль температуры при прохождении электрического тока. Принято считать, что джоулево тепло выделяется на сопротивлении. Это действительно так в «классических» системах при протекании электрического тока, когда проводимость локальная функция. Термин «классическая система» означает, что напряжение существенно меняется на масштабах, много больших длины сбоя фазы (или длины энергетической релаксации) электрона. Механизмы образования джоулева тепла в классических системах довольно хорошо изучены, чего нельзя сказать про квантовые системы. Нетривиальной характерной особенностью квантовой наносистемы выступает нелокальность проводимости, и, как следствие, нелокальность генерации тепла током. В этом случае сопротивление обусловлено рассеянием носителей заряда в определенной области системы, через которую течет ток, а диссипация энер-

гии с выделением джоулева тепла происходит вдалеке от рассеивателя, например в глубине электродов. Это происходит, например, в точечных (и туннельных) квантовых контактах, когда ровно половина джоулева тепла выделяется в объеме левого электрода, а другая половина — в правом электроде (температуры электродов предполагаются равными). Важной задачей является понимание фундаментальных механизмов диссипации энергии в квантовых наноструктурах при прохождении электрического тока и оптимизация режима охлаждения.

Было бы естественно исследовать в квантовых наносистемах с сильными электронными корреляциями возможность квантования тепловых потерь. Такая ситуация реализуется в гранулированных проводниках в режиме кулоновской блокады, когда основной вклад в ток дают процессы неупругого котуннелирования, см. рис. 1. Квантовый режим в такой системе реализуется, когда электростатическая энергия одного избыточного электрона на грануле значительно больше напряжения и температуры гранул, и сопротивление туннельных контактов между гранулами и между гранулами и электродами много больше кванта сопротивления. Можно показать [1], что тогда в каждой грануле в единицу времени выделяется одинаковая универсальная доля джоулева тепла  $\dot{Q}$ , равная

$$\frac{\dot{Q}}{I \cdot V} = \frac{1}{n+1},\tag{1}$$

где I — это ток , V — напряжение на контактах, и n — число гранул в цепочке на рис. 1. Рациональное число в правой части ур. (1) не зависит от формы гранул и микроскопических деталей туннельных контактов. В каждом из контактов выделяется половина этой доли тепла: 1/(2(n+1)).

1. Chtchelkatchev N.M., Glatz A., and Beloborodov I.S., Phys. Rev. B 88, 125130 (2013).

Магнитные явления

### Теоретические исследования резонансной динамики доменных стенок в многослойных ферромагнитных структурах

Абакумова Н.Н.\*, Кудрявцев Р.В., Гумеров А.М., Муртазин Р.Р.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия \*e-mail: abakumovan@rambler.ru

В последнее время широко исследуются многослойные магнитные структуры в связи с возможностью их практического применения [1,2]. Часто они представляют собой периодически чередующиеся слои двух материалов с различными физическими свойствами. В настоящее время часто изучается динамика спиновых волн и магнитных неоднородностей, распространяющихся в таких системах перпендикулярно границам раздела слоев [3–5]. Отметим, что часто именно изучение одномерных моделей позволяет понять влияние тех или иных магнитных параметров на рассматриваемый процесс. Показано, что наличие тонкого слоя с параметрами магнитной анизотропии меньшей, чем в соседних слоях, может приводить, например, к появлению зародыша новой магнитной фазы, новым динамическим эффектам, таким как отражение движущейся доменной границы (далее ДГ) от «притягивающего потенциала». В настоящей работе проведено исследование влияния пространственной модуляции параметров магнитной анизотропии и обмена на резонансую нелинейную динамику ДГ в трех– и пятислойном ферромагнетике с учетом возможности возбуждения локализованных магнитных неоднородностей, внутренних мод колебаний ДГ и излучения объемных волн.

Найдены возможные частоты колебаний генерируемых в тонких слоях локализованных магнитных неоднородностей. На примере двух одинаковых тонких слоев в пятислойном ферромагнетике показано, что коллективные эффекты влияния слоев на динамику ДГ во многом связаны с резонансным обменом энергией между локализованными волнами. Найдено наличие критического расстояния между тонкими слоями, разделяющее две области с качественно различным поведением системы. Доказана возможность существования диапазона параметров, в котором для прохождения ДГ через оба слоя требуется существенно меньше энергии. Показано, что затухание и внешняя сила противодействуют возникновению резонансного отражения ДГ от притягивающего тонкого слоя, однако вызывающая его причина — резонансный обмен энергией между локализованными волнами — по–прежнему имеет место. Для экспериментального обнаружения резонансных эффектов отражения и квазитуннелирования ДГ в реальных физических экспериментах предложен метод измерения амплитуды колебаний центра ДГ и использование физических систем с достаточно слабым затуханием.

- 1. Hubert A., Schafer R., Magnetic domains. Springer-Verlag, Hedelberg, Berlin (1998).
- 2. Шамсутдинов М.А. и другие, Ферро– и антиферромагнитодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны, М.: Наука (2009).
- 3. Екомасов Е.Г., Азаматов Ш.А., Муртазин Р.Р., Физика металлов и металловедение 105(4), 313 (2008).
- 4. Екомасов Е.Г., Азаматов Ш.А., Муртазин Р.Р., Физика металлов и металловедение 108(6), 532 (2009).
- 5. Ekomasov E.G., Murtazin R.R., Bogomazova O.B., Gumerov A.M., J. Magn. Magn. Mater. 339, 133 (2013).

# Влияние температуры на магнитные и магниторезистивные свойства пленок типа FeNi/FeMn

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

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: adanakova@yandex.ru

Магнитные пленки на основе обменно–связанных ферромагнитного слоя пермаллоя и антиферромагнитного слоя Fe<sub>50</sub>Mn<sub>50</sub> представляют научный интерес в связи с изучением механизмов однонаправленной анизотропии и имеют определённый потенциал практического применения [1]. Данное исследование посвящено изучению температурных зависимостей функциональных свойств указанных объектов как сред для магнитной сенсорики.

В представленной работе исследовались слоистые плёночные структуры  $SiO_2/Ta(5)/Fe_{20}Ni_{80}(5)/Fe_{50}Mn_{50}(20)/Fe_{20}Ni_{80}(40)/Ta(5)$  (в скобках указана толщина слоев в нм), полученные методом магнетронного распыления сплавных мишеней с применением высокочастотного смещающего электрического напряжения на подложке. Эксперимент проводился на образцах, не подвергавшихся специальной обработке (тип А), и прошедших дополнительный отжиг в вакууме в течение 1 ч при температуре 400°С (тип В). Измерения магниторезистивных петель, по которым определялись поле магнитного смещения  $H_e$  и магниторезистивное отношение  $\Delta R/R$ , проводились четырёхзондовым методом на магнитометре Lake Shore Cryotronics 7407 VSM в магнитном поле напряженностью до 170 Э и в диапазоне температур 78 ÷ 470 К.



Рис. 1. Температурные зависимости поля магнитного смещения  $H_{\rm e}$  (a) и магнитосопротивления  $\Delta R/R$  (б) в образцах типа A (кривые 1) и типа B (кривые 2).

На рис. 1 приведены температурные зависимости поля смещения функционального (верхнего) слоя Fe<sub>20</sub>Ni<sub>80</sub> и магниторезистивного отношения в образцах типа A и B. Они показывают, что обменная связь между слоями в отожжённой плёночной структуре обладает большей температурной стабильностью, а наблюдаемый в ней магниторезистивный эффект превосходит аналогичную характеристику образца, не подвергавшегося термомагнитной обработке. Дан анализ причин выявленных закономерностей и констатировано, что термообработка является важным элементом технологии, оптимизирующим функциональные свойства подобных магниторезистивных сред.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, договор № 02.G36.31.0004.

1. R. Coehoorn, Handbook of Magnetic Materials 15, 1 (2003).

# Атомные магнитные моменты в аморфных пленочных структурах R–Co (R = La, Gd, Tb)

Аданакова О.А.\*, Балымов К.Г., Кулеш Н.А., Свалов А.В., Степанова Е.А., Васьковский В.О.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: danakova@yandex.ru

Аморфные плёнки сплавов 3d-переходных металлов с редкоземельными элементами известны как магнетики с широко варьируемыми величиной и характером температурной зависимости спонтанной намагниченности. Определяющую роль в этом играют эффективные атомные магнитные моменты, формирование которых в аморфном состоянии имеет определённую специфику [1]. Целью настоящей работы стало изучение концентрационных зависимостей атомных магнитных моментов в плёнках, содержащих Со и лантаноиды (R = La, Gd, Tb) с существенно различной электронной структурой.

Рентгеноаморфные плёнки типа R–Со толщиной ~100 нм были получены методами высокочастотного ионного распыления мозаичных мишеней (серия А) и магнетронного сораспыления однокомпонентных мишеней (серия В). Состав образцов определялся неразрушающим образом с помощью рентгенофлуоресцентного анализа. Низкотемпературные (5 К) магнитные измерения выполнялись на магнитометре MPMSXL–7.



Рис. 1. Концентрационные зависимости магнитного момента атомов гадолиния в пленках  $Gd_xCo_{100-x}$  (а) и магнитного момента атомов тербия в пленках  $Tb_xCo_{100-x}$  (б), полученных разными методами: 1 — серия А, 2 — серия В.

Получены данные по спонтанной намагниченности основного состояния всех исследованных систем. На плёнках  $La_x Co_{100-x}$  установлена зависимость магнитного момента атомов кобальта  $\mu_{Co}(x)$ от содержания редкоземельного элемента. С её использованием определены концентрационные зависимости магнитных моментов атомов редкоземельных металлов в ферримагнитных системах  $Gd_x Co_{100-x}$  и  $Tb_x Co_{100-x}$ . Из рис. 1 видно, что  $\mu_{Gd}$  практически не зависит от состава, а  $\mu_{Tb}$  уменьшается с ростом *x*, что отражает специфику магнитных структур (коллинеарный ферримагнетизм и сперимагнетизм) исследованных систем. Найдено, что на параметры сперимагнитной структуры оказывает влияние способ получения плёнок (кривые 1 и 2 на рисунке 1б).

Работа выполнена при поддержке РФФИ и Правительства Свердловской области (грант № 13–02–96027).

1. Ushiyama S., Mat. Chem. and Phys. 42, 38 (1995).

### Магнитные свойства соединений редкоземельных металлов

Андреева А.Ю.\*, Коротаев Е.В., Бушуев М.Б., Сыроквашин М.М.

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия \*e-mail: morena-morana@rambler.ru

Несмотря на то, что доля лантаноидов (Ln) в земной коре составляет около 0.02%, в последнее время появился повышенный интерес к изучению соединений лантаноидов, обусловленный расширением области их применения в передовых областях техники. С применением лантаноидов связано производство лазеров, люминофоров, катализаторов, высокотемпературных сверхпроводников, изготовление постоянных магнитов и т.д., обладающих высокими эксплуатационными свойствами.

Данная работа посвящена исследованию комплексов  $ErCl_3 \cdot 6H_2O$ ,  $DyCl_3 \cdot 6H_2O$ ,  $YbCl_3 \cdot 6H_2O$  с помощью методов статической магнитной восприимчивости и рентгеновской эмиссионной спектроскопии.

Были исследованы температурные зависимости магнитной восприимчивости данных образцов на весах Фарадея. Ранее данные образцы уже изучались, за исключением  $YbCl_3 \cdot 6H_2O$ , и магнитные свойства по этим соединениям приведены в статье [1]. Но в работе [1] не изучена природа взаимодействий.

В ходе проведенных исследований получены рентгеновские эмиссионные спектры  $Clk_{\alpha_{1,2}}$ ,  $Clk_{\beta_{1,2}}$ этих соединений, несущие информацию о распределении 3p-состояний атома хлора в валентной полосе исследуемых соединений. Был сделан вывод, что в данных соединениях присутствуют обменные взаимодействия через атомы хлора и выявлена корреляция между расстоянием Ln - Cl - Ln и константой Вейсса.

Получены температурные зависимости магнитной восприимчивости четырехъядерных комплексов  $Er_4(C_5H_{11}O_2)_6(C_6H_3N_2SO)_4(OH)_2$  и  $Dy_4(C_5H_{11}O_2)_4(C_6H_3N_2SO)_6(OH)_2$ , что представляет колоссальный интерес, так как эти образцы были синтезированы впервые. На данный момент изучается механизм обменных взаимодействий в этих комплексах.

1. Lagendijk E., Huiskamp W.J., Physica (CityplaceAmsterdam) 65(1), 118 (1973).

# Магнитные и магнитотепловые свойства соединений $Mn_{0.92}Co_{0.98}Ge$ и $Mn_{0.8}Co_{1.1}Ge$

Аникина И.Н.\*, Аникин М.С., Тарасов Е.Н., Осадченко В.Х., Зинин А.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: egik1988@mail.ru

Соединение MnCoGe — это ферромагнетик, имеющий гексагональную структуру типа Ni<sub>2</sub>In. Сплавы Mn<sub>1.9-x</sub>Co<sub>x</sub>Ge нестехиометрического состава интересны тем, что в области концентраций происходит структурный переход и изменение типа магнитной кристаллографической анизотропии [1]. В данной работе были исследованы x = 0.9-1.2 магнитные и магнитотепловые свойства соединений и из указанной выше области.

Данные сплавы были выплавлены в индукционной печи в кварцевом тигле в атмосфере аргона с последующей гомогенизацией. Измерения магнитных свойств проведены на MPMS XL7 Quantum Design в магнитных полях до 7 Тл в температурном интервале от 4.2 до 350 К. Магнетокалорический эффект (МКЭ) был определен двумя различными способами: как прямым измерением адиабатического изменения температуры магнетика при его намагничивании (размагничивании) ( $\Delta T$ -эффект) в магнитном поле 0.46 Тл, так и расчетом изменения магнитной части энтропии из серии изотерм намагничивания по уравнениям Максвелла.

Анализ вида зависимостей намагниченности от температуры в магнитном поле 0.5 Тл показал однофазность исследуемых образцов. Температуры магнитного упорядочения оказались равными 268 К и 277 К для образцов  $Mn_{0.92}Co_{0.98}$ Ge и  $Mn_{0.8}Co_{1.1}$ Ge соответственно. Соединения с x = 1.1 и 0.98 имеют значения величины  $\Delta T$ -эффекта, равные соответственно 0.45 К и 0.72 К в магнитном поле 0.46 Тл. Величина изменения магнитной части энтропии ( $-\Delta S$ ) для исследуемых образцов в магнитном поле 0.5 Тл равна 0.61 Дж/(кг·К) и 0.37 Дж/(кг·К) соответственно.

Полученные значения МКЭ, отличающиеся в два раза по величине, возможно объясняются изменением структуры и типа магнитной анизотропии при изменении состава.

1. Маркин П.Е., Мушников Н.В. и др., ФММ 106, 498 (2008).

### Аномалии магнитотепловых свойств соединений Ho(Co – Fe)<sub>2</sub>

#### <u>Аникин М.С.</u>\*, Тарасов Е.Н., Зинин А.В.

#### Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: maksim.anikin@urfu.ru

Недавно при исследовании квазибинарной системы  $Ho(Ni - Fe)_2$  было обнаружено, что замещение никеля Fe приводит к аномальному магнитокалорическому эффекту (МКЭ) [1]. Аномалия МКЭ проявилась в его наличии в широком температурном диапазоне, в отличие от известных магнитокалорических материалов. Позднее такое поведение МКЭ наблюдалось в других родственных соединениях [2]. Эти данные побудили нас провести исследования магнитных свойств и МКЭ соединения  $Ho(Co_{1-x}Fe_x)_2$  (x = 0, 0.04, 0.07, 0.12).

Исследуемые соединения были выплавлены в индукционной печи в кварцевом тигле в атмосфере аргона с последующей гомогенизацией. Рентгеноструктурный анализ, проведенный на рентгеновском дифрактометре Bruker D8 Advance, показал, что исследуемые соединения практически однофазны и имеют структуру типа MgCu<sub>2</sub> с пространственной группой *Fd* m3. Измерения магнитных свойств проведены на MPMS XL7 Quantum Design в магнитных полях до 7 Тл в температурном интервале от 4.2 до 350 К. Определение величины МКЭ производилось как непосредственным измерением  $\Delta T$ -эффекта на установке для прямого измерения МКЭ в магнитном поле 0.46 Тл, так и путем расчета изменения магнитной части энтропии из серии изотерм намагничивания по уравнениям Максвелла.

Далее по результатам магнитных измерений была определена температура Кюри фаз указанного состава, равная соответственно 83, 151, 183 и 260 К. При замещении кобальта железом в исходном соединении HoCo<sub>2</sub> наблюдается изменение типа магнитного фазового перехода с первого рода на второй. Для образцов с x = 0.07 и 0.12 температурные зависимости изменений магнитной части энтропии  $\Delta S(T)$  имеют значительное уширение пика в области ниже температуры Кюри при увеличении приложенного магнитного поля. Уширение пика наблюдается и при увеличении концентрации железа. Аналогичное уширение пика наблюдалось и в работах [2]. Величина хладоемкости (q) [3] образца с x = 0.12 в магнитном поле 5 Тл равна 612 Дж/кг, что существенно больше, чем в работе [2] для соединения Tb(Co<sub>0.7</sub>Fe<sub>0.3</sub>)<sub>2</sub>, где величина q (обозначено как RCP) составила 299 Дж/кг ( $\mu_0 H = 5$  Tл). Кроме того, уширение пика МКЭ подтверждается и прямыми измерениями  $\Delta T$ -эффекта, где при увеличении нии содержания железа увеличивается ширина пика на половине высоты ( $\Delta T_{\rm FWHM}$ ) даже в магнитном поле 0.46 Тл,  $\Delta T_{\rm FWHM}$  у образцов с x = 0.04 и 0.12 отличается более чем в два раза.

В работе показано, что частичное замещение кобальта железом в соединении HoCo<sub>2</sub> приводит к изменению типа магнитного фазового перехода и резко повышает температуру Кюри. Замена ионов кобальта на ионы железа в d-подрешетке приводит к значительному увеличению диапазона  $\Delta T_{\rm FWHM}$  и хладоемкости, существенно превышая данные параметры аналогичных соединений с  $T_{\rm C}$ , близкой к комнатной температуре. Аномалии температурного хода энтропии обсуждаются с точки зрения возможной рандомизации магнитного момента редкоземельной подрешетки, вызванной добавкой железа.

Работа выполнена при поддержке Государственного контракта УрФУ № 2582.

- 1. Singh N.K., Agarwal S. et al., Phys. Rev. B 72, 014452 (2005).
- 2. Halder M., Yusuf S.M. et al., Phys. Rev. B 81, 174402 (2010).
- 3. Gschneidner K.A. Jr., Pecharsky V.K., Annu. Rev. Mater. Sci. 30, 387 (2000).

#### Магнитоотражение и магнитопропускание халькогенидных шпинелей

Бучкевич А.А.<sup>1</sup>\*, Сухоруков Ю.П.<sup>1</sup>, Телегин А.В.<sup>1</sup>, Наумов С.В.<sup>1</sup>, Федоров В.А.<sup>2</sup>, Менщикова Т.К.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия \*e-mail: buchkevich@imp.uran.ru

Одновременное управление отражением и пропусканием электромагнитного излучения веществом посредством магнитного поля является актуальной задачей физики магнитных явлений. Ранее такая возможность была продемонстрирована для манганитов, обладающих колоссальным магнитосопротивлением [1]. В то же время такие исследования в классических магнитных полупроводниках (например, шпинели) в неполяризованном свете практически не проводились.

В данной работе было проведено исследование магнитоотражения (МО) и магнитопропускания (МП) неполяризованного ИК–излучения в монокристаллическом образце хромхалькогенидной шпинели *p*-типа HgCr<sub>2</sub>Se<sub>4</sub> в сравнении с данными магнитных и электрических измерений. Монокристалл был выращен методом химических транспортных реакций в лаборатории магнитных полупроводников ИФМ УрО РАН [2]. Для исследования оптических свойств использовалась криомагнитная установка на базе спектрометра ИКС–21М. МО и МП рассчитывались как относительное изменение интенсивности отраженного и прошедшего света в магнитном поле и без поля.

Спектры отражения и пропускания монокристаллов являются характерными для этого состава [1]. Все изменения оптических и электрических свойств кристалла наблюдались при  $T < T_c$  ( $T_c \sim 106$  K). Внешнее магнитное поле приводит к появлению эффектов положительного магнитопропускания (до 80% в поле 8 кЭ) и магнитоотражения света (до 3% в поле 3 кЭ), максимальных при  $T < T_c$ , что является характерным для p-типа шпинелей. Эффекты наблюдаются в широкой ИК-области спектра от 1 до 20 мкм и демонстрируют насыщение в малых магнитных полях порядка 250 Э. Природа эффектов связана со сдвигом края поглощения под действием поля, полевым изменением спин–зависимых переходов и вклада свободных носителей заряда [3]. Величина и знак МО и МП в шпинелях существенно зависят от дефектности кристалла, типа проводимости и ориентации поля относительно кристаллографических осей, что требует продолжения исследований.

Полученные результаты являются важными для изучения природы магнитоотражения и магнитопропускания света в магниторезистивных магнетиках и практического применения обнаруженных эффектов.

Работа выполнена в рамках госзадания СПИН РК–01201463330 при поддержке грантов РФФИ № 13–02–00007 и программы Президиума РАН № 12–П–2–1034.

- 1. Сухоруков Ю.П., Лошкарёва Н.Н., Телегин А.В., Мостовщикова Е.В., Оптика и спектроскопия **116**(6), 73 (2014).
- 2. Чеботаев Н.М., Симонова М.И., Арбузова Т.И., Гижевский Б.А., Самохвалов А.А., Неорганические материалы **21**(9), 1468 (1985).
- 3. Ауслендер М.И., Бебенин Н.Г.и др., ЖЭТФ **95**(1), 247 (1989).

# Магнитные свойства сплавов и ультрадисперсных порошков системы Mn–Al

Волков К.Д.\*, Тарасов Е.Н., Зинин А.В., Андреев С.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: volkovkd@rambler.ru

В последнее время из-за резкого повышения цен на редкоземельные металлы активно ведутся исследования известных магнитотвердых материалов, не содержащих редкоземельные элементы и не нашедших коммерческого применения ввиду сложности технологии получения из них постоянных магнитов. Среди этих материалов в первую очередь можно отметить сплавы MnAl и MnAlC [1].

Технология получения постоянных магнитов из сплава Mn и Al paнee активно разрабатывалась начиная с 1958 г. [2]. Было определено, что при определенных условиях термообработки в этом материале образуется метастабильная ферромагнитная τ–фаза с гранецентрированной тетрагональной решеткой, которая обладает высокой константой магнитной анизотропии. Ферромагнитная τ–фаза может быть стабилизирована за счет небольшой добавки углерода. В литом состоянии коэрцитивная сила сплава низка и для улучшения гистерезисных магнитных свойств использовалась высокотемпературная пластическая деформация.

Элементы высокотемпературной пластической деформации (экструзия) в технологии получения явились препятствием для коммерциализации постоянных магнитов этого класса соединений.

В данной работе были проведены исследования магнитных свойств сплавов  $Mn_{55}Al_{45}$  и  $Mn_{54}Al_{43}C_3$  в зависимости от метода их получения и скорости охлаждения, были определены оптимальные температуры и время отжига для стабилизации ферромагнитной  $\tau$ -фазы. Высококоэрцитивное состояние было получено размолом быстрозакаленной ленты сплавов в высокоэнергетической мельнице типа аттритор.

В результате исследований были получены образцы с удельной намагниченностью 80 Гс · см<sup>3</sup>/гр и коэрцитивной силой до 4.4 кЭ.

Для сплава системы Mn — Al, полностью состоящего из ферромагнитной фазы, максимально возможное значение магнитной энергии  $(BH)_{\rm max}$  составляет 12 МГс·Э [3]. Магниты с такими свойствами могут занять нишу между ферритовыми (ALNICO) и редкоземельными постоянными магнитами, они станут отличной заменой дорогих редкоземельных магнитов во многих устройствах.

Работа выполнена при поддержке государственного контракта УрФУ № 2582.

- 1. Jimenez-Villacorta F., Marion J.L., Oldham J.T., Daniil M., Willard M. A., Lewis L.H., Metals 4, 8 (2014).
- 2. Kono H., J. Phys. Soc. Jpn. 13, 1444 (1958).
- Кекало И.Б., Самарин Б.А, Физическое металловедение прецизионных сплавов. Сплавы с особыми магнитными свойствами, Металлургия (1989).

# Магнитные свойства Fe–Cr–Co сплавов с содержанием кобальта до 7 масс.%

#### <u>Вомпе Т.А.</u>\*, Миляев И.М.

#### Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия \*e-mail: tvompe@gmail.com

Магнитотвёрдые сплавы на основе системы Fe — Cr — Co широко используются в производстве малогабаритных постоянных магнитов [1]. По своим магнитным свойствам они занимают промежуточное положение между магнитотвёрдыми ферритами (бариевые, кобальтовые и стронциевые) и дорогостоящими спечёнными редкоземельными постоянными магнитами, а также близки к магнитам из наиболее широко используемого в технике сплава ЮНДК24 или Алнико 5. Снижение содержания кобальта в Fe — Cr — Co сплавах как самого дорогого компонента и улучшение магнитных свойств является актуальной задачей в исследовании этих материалов.

Цель работы — исследование влияния основных и легирующих элементов на магнитные гистерезисные свойства (*B*<sub>r</sub>, *H*<sub>c</sub>, (*BH*)<sub>max</sub>) магнитотвёрдых материалов системы Fe — Cr — Co с содержанием кобальта до 7 масс.%.

В качестве объекта исследования были выбраны и изготовлены сплавы X(24–31)К(6–13)М(1–3)С методами порошковой металлургии [2].

Исследование влияния основных и легирующих элементов на магнитные гистерезисные свойства сплавов системы Fe – Cr – Co и их оптимизацию проводили методом планирования эксперимента с помощью программ Statgraphics Plus 5.1 и Statistica 5.0. В качестве нулевого состава был взят магнитотвёрдый порошковый сплав X28К102MC. Для получения магнитного состояния в магнитотвёрдых материалах применяют ступенчатую термообработку, которую проводили в лабораторной печи с панцирным электромагнитом в магнитном поле более 3000 Э. Магнитные гистерезисные свойства измеряли на гистерезисографе Permagraph L EP–3.

Были получены уравнения регрессии для магнитных свойств и построены диаграммы Парето, из которых определили статистическую значимость коэффициентов уравнений регрессии. Полученные экспериментально магнитные гистерезисные свойства сравнивали с данными оценки уравнений регрессий.

Выбранные параметры оптимизации (скорость охлаждения и температура начала обработки) оказывают существенное влияние на магнитные гистерезисные свойства. По полученным поверхностям отклика выбраны интервалы наилучшей термообработки для каждого сплава.

По результатам проведенных термообработок на изученных сплавах получены следующие максимальные магнитных гистерезисные свойства:

Х26К12МС —  $H_c = 42 \text{ кА/м}, B_r = 1.34 \text{ Тл}, (BH)_{max} = 36 \text{ кДж/м}^3;$ Х25К102МС —  $H_c = 31 \text{ кА/м}, B_r = 1.35 \text{ Тл}, (BH)_{max} = 20 \text{ кДж/м}^3;$ Х2612КЗМС —  $H_c = 45 \text{ кА/м}, B_r = 1.25 \text{ Тл}, (BH)_{max} = 30 \text{ кДж/м}^3.$ 

Работа поддержана грантом УМНИК № 2156.

1. Артамонов Е.В., Либман М.А. и др., Сталь 6, 65, (2007).

2. Вомпе Т.А., Миляев И.М., Юсупов В.С., Перспективные материалы 4, 59, (2013).

# Исследование резонансного взаимодействия доменных границ с дефектами в модели синус–Гордона

Гумеров А.М.\*, Кудрявцев Р.В., Абакумова Н.Н.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия \*e-mail: xc.89@mail.ru

Задача влияния дефектов на доменные границы ферромагнетика при определённых условиях сводится к изучению модифицированного уравнения синус–Гордона (МУСГ) [1]:

$$u_{tt} - u_{xx} + \sin u = -\alpha u_t + f(x, t), \tag{1}$$

где u = u(x,t) — угол отклонения вектора намагниченности, а учитывает наличие диссипации, f(x,t) — внешнюю силу и неоднородность константы магнитной анизотропии (наличие дефектов). МУСГ имеет приближённые решения в виде солитонов — уединённых волн. Доменная граница моделируется солитоном типа кинк. Было показано [1], что взаимодействие кинков МУСГ, движущихся по инерции, с точечными примесями может приводить к возбуждению «примесной» моды и к таким резонансным эффектам, как отражение кинка от притягивающего потенциала [2]. Для изучения резонансной динамики кинков нами была разработана программа [3], реализующая высокую точность численного решения МУСГ. Для случая одной и двух примесей были численно найдены все возможные сценарии кинк–примесных взаимодействий при различных параметрах системы. С помощью метода коллективных переменных [4] с учетом внешнего поля h и диссипации нами было получено приближённое уравнение движения для координаты центра кинка x(t) в случае двух точечных примесей «глубины»  $\varepsilon$  на расстоянии d друг от друга:

$$8[\ddot{x} + \alpha \dot{x} - h] + a_1[F_1' + F_2'e^{-\varepsilon d/2}] + a_2[F_1'e^{-\varepsilon d/2} + F_2'] + U_1' + U_2' = = 1/2a_1^2[U_1' + U_2'e^{-\varepsilon d}] + 1/2a_2^2[U_1'e^{-\varepsilon d} + U_2'] + a_1a_2[U_1' + U_2']e^{-\varepsilon d/2}.$$
(2)

Здесь точки — производные по времени, штрихи — производные по x(t); функции:

$$F_{1}(x(t)) = -2\varepsilon h(x(t))/ch^{2}(x(t)), \quad F_{2}(x(t)) = -2\varepsilon h(x(t)-d)/ch^{2}(x(t)-d), \\ U_{1}(x(t)) = -2\varepsilon/ch^{2}(x(t)), \quad U_{2}(x(t)) = -2\varepsilon/ch^{2}(x(t)-d),$$
(3)

 $a_1(t)$  и  $a_2(t)$  — амплитуды примесных мод, для которых тоже были получены приближённые уравнения. Одно из них:

$$\begin{aligned} &[\ddot{a}_1 + \alpha \dot{a}_1][1 - \varepsilon^2 E^2] + \varepsilon \{F_1[1 - \varepsilon E e^{-\varepsilon d/2}] + F_2[e^{-\varepsilon d/2} - \varepsilon E]\}/2 + a_1\{\Omega_0^2 + \varepsilon^2 \gamma E/2 + \\ &+ \varepsilon U_1[\varepsilon E e^{-\varepsilon d/2} - 1]/2 + \varepsilon U_2[\varepsilon E - e^{-\varepsilon d/2}]e^{-\varepsilon d/2}/2\} - \\ &- a_2\{\varepsilon \Omega_0^2 E + \varepsilon \gamma/2 + \varepsilon U_1[1 - \varepsilon E e^{-\varepsilon d/2}]e^{-\varepsilon d/2}/2 + \varepsilon U_2[e^{-\varepsilon d/2} - \varepsilon E]/2\} = 0. \end{aligned}$$

$$\tag{4}$$

Второе — аналогично. Параметры

$$E = (1/\varepsilon + d/2) e^{-\varepsilon d/2}, \ \Omega_0^2 = 1 - \varepsilon^2/4 - \varepsilon^2 e^{-\varepsilon d}/2, \ \gamma = \varepsilon e^{-\varepsilon d/2} + 2\left(\varepsilon^2/4 - 1\right) E.$$
(5)

Построенная динамическая система качественно описывает результаты исследованных численно кинк–примесных взаимодействий.

- 1. Браун О.М., Кившарь Ю.С., Модель Френкеля–Конторовой. Концепции, методы, приложения, Физматлит (2008).
- 2. Piette B., Zakrzewski W.J., J. Phys, A: Math. Theor 40, 5995 (2007).
- 3. Гумеров А.М., Муртазин Р.Р., Екомасов Е.Г., Программный пакет для моделирования нелинейных волн модифицированного уравнения синус–Гордон. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013616082 от 26.06.2013.
- 4. Шамсутдинов М.А., Назаров В.Н., Ломакина И.Ю. и др., Ферро- и антиферромагнитодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны, Наука (2009).

### Электрические и магнитные свойства сплавов Гейслера Ni<sub>50</sub>Mn<sub>36</sub>Sb<sub>14-x</sub>Me $_x$ (Me = Al, Ge; x = 0, 1, 2, 3)

<u>Емельянова С.М.</u><sup>1\*</sup>, Марченков В.В.<sup>1</sup>, Патраков Е.И.<sup>1</sup>, Марченкова Е.Б.<sup>1</sup>, Белозерова К.А.<sup>1</sup>, Гагарская М.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: 890 sm@mail.ru

Основной причиной повышенного интереса к материалам, обладающим большим магнетокалорическим эффектом, является возможность их применения в качестве твердотельных хладагентов в магнитных холодильниках [1,2]. Такие холодильники имеют очевидные преимущества: потребляют на 20–30% меньше электроэнергии по сравнению с обычными газовыми рефрижераторами, используемые в них в качестве рабочих тел вещества являются малотоксичными [3].

Значительный магнетокалорический эффект был обнаружен в ферромагнитных сплавах Гейслера с памятью формы, например на основе Ni – Mn – Sn, Ni – Mn – Ga, Ni – Mn – In. В этих сплавах намагниченность фаз мартенсита и аустенита, находящихся в ферромагнитном состоянии, различна, что приводит к значительному магнетокалорическому эффекту вблизи мартенситного перехода [4]. Подобное мартенситное превращение также наблюдалось в сплаве Гейслера Ni – Mn – Sb [5]. Целью данной работы являлось изучение влияния замещения атомов Sb атомами Al и Ge на магнитные и электрические свойства исследуемых сплавов.

Объектами исследования в данной работе служили сплавы Гейслера Ni<sub>50</sub>Mn<sub>36</sub>Sb<sub>14-x</sub>Al<sub>x</sub> и Ni<sub>50</sub>Mn<sub>36</sub>Sb<sub>14-x</sub>Ge<sub>x</sub> (x = 0, 1, 2, 3), приготовленные в дуговой печи в инертной атмосфере. Полученные слитки были подвергнуты отжигу при температуре 1123 К в течение 24 часов с последующим охлаждением в печи. Элементный анализ, который проводился с помощью сканирующего электронного микроскопа (Inspect F, FEI Company), оснащенного EDAX спектрометром, показал, что состав объемных образцов соответствует заданному. Рентгеноструктурные исследования подтвердили присутствие во всех образцах структуры  $L2_1$ . Измерения электросопротивления были выполнены в интервале температур от 4.2 до 300 К стандартным четырехзондовым методом. Измерения намагниченности проводились на СКВИД–магнетометре (MPMS XL7, Quantum Design) при температурах от 4.2 до 330 К в магнитных полях до 1 Тл.

Для сплавов Ni<sub>50</sub>Mn<sub>36</sub>Sb<sub>14</sub>, Ni<sub>50</sub>Mn<sub>36</sub>Sb<sub>14-x</sub>Al<sub>x</sub> и Ni<sub>50</sub>Mn<sub>36</sub>Sb<sub>14-x</sub>Ge<sub>x</sub> (x = 2) из кривых температурной зависимости намагниченности были определены характерные температуры фазового перехода (начала и конца аустенитного  $A_s$ ,  $A_f$  и мартенситного  $M_s$ ,  $M_f$  превращений). Для всех исследованных сплавов знак изменения магнитной энтропии  $\Delta S_M$  оказался положительным. В результате показано, что замещение атомов Sb атомами Ge приводит к сдвигу максимума  $\Delta S_M$  от T = 235 K в область более низких температур. Напротив, если Sb замещен атомами Al, то это приводит к смещению  $\Delta S_M$  в область комнатных температур до 290 K и выше. При этом существенные изменения наблюдаются и в поведении электронных транспортных свойств.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта УрО РАН № 12–У–2–1036 и гранта РФФИ № 12– 03–00050.

1. Pecharsky V.K., Gschneider K.A. Jr., Phys. Rev. Lett. 78, 4494 (1997).

2. Tegus O. et al., Nature (London) 415, 150 (2002).

3. Gschneider K.A. et al., Rep. Prog. Phys. 68, 1479 (2005).

4. Du J. et al., J. Appl. Phys. 40, 5523 (2007).

5. Sutou Y. et al., Appl. Phys. Lett. 85, 4358 (2004).

#### Влияние магнитного поля на фазовые переходы в растворах гибкоцепных полимеров

Жернов И.В.\*, Галяс А.Г., Вшивков С.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: zhernov.ilya@gmail.com

В последнее время на кафедре высокомолекулярных соединений Уральского федерального университета проводится исследование влияния постоянного магнитного поля на фазовые переходы, структуру и реологические свойства растворов жесткоцепных полимеров (эфиров целлюлозы), в которых реализуются фазовые жидкокристаллические переходы. Обнаружено, что при воздействии магнитного поля изменяется температура фазовых жидкокристаллических переходов, увеличиваются размеры надмолекулярных частиц и вязкость растворов [1]. Однако сведения об аналогичных исследованиях растворов гибкоцепных полимеров отсутствуют. В связи с этим целью настоящей работы явилось изучение влияния магнитного поля на фазовые переходы в растворах полиэтилена.



Рис. 1. Концентрационная зависимость разности температур фазового разделения в магнитном поле и в его отсутствие ( $\Delta T$ ) системы полиэтилен ( $M = 1.5 \cdot 10^5$  Да) — о-ксилол: 1 — H = 3.6 кЭ, 2 — H = 9 кЭ.

Исследовали два образца полиэтилена с молекулярными массами  $1.5 \cdot 10^5$  и  $3.5 \cdot 10^4$  Да. В качестве растворителя использовали о-ксилол, о чистоте которого судили по показателю преломления. Растворы готовили в стеклянных ампулах, помещая в них навески полимера и растворителя. Смеси охлаждали в сосуде Дьюара с жидким азотом до их замерзания. Затем ампулы запаивали и выдерживали в течение 10 суток при 403 К.

Температуры фазового разделения определяли методом Алексеева, согласно которому за температуру фазового перехода принимают температуру помутнения раствора. Для изучения влияния магнитного поля использовали магниты с напряженностью 3.6 и 9.0 кЭ.

Обнаружено, что магнитное поле приводит к увеличению степени кристалличности полиэтилена и повышению температуры фазового разделения его

растворов в о-ксилоле на 5–6 К. При этом концентрационная зависимость влияния магнитного поля на кристаллическое разделение фаз системы ПЭ—о-ксилол описывается кривой с максимумом (рис. 1).

Аналогичный результат был получен при исследовании влияния магнитного поля на фазовые переходы в системе гидроксипропилцеллюлоза — вода [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 12-08-00381-а).

- 1. Вшивков С.А., Фазовые переходы полимерных систем во внешних полях, АМБ (2011).
- 2. Вшивков С.А., Русинова Е.В., Высокомолек. соед. 50 (7), 1114 (2008).

### Кинетика разрушения парамагнитных центров, образовавшихся при химическом дегидрофторировании поливинилиденфторида, в условиях ограниченного объёма воздуха

#### Живулин В.Е.\*, Злобина Н.А., Песин Л.А.

Челябинский государственный педагогический университет, Челябинск, Россия \*e-mail: zhivulinve@mail.ru

Поливинилиденфторид (ПВДФ) — полимерный материал, молекулы которого состоят из углеродного скелета, в котором к каждому атому углерода попеременно присоединены два атома фтора и водорода [1]. ПВДФ является перспективным исходным материалом для синтеза квазиодномерных углеродных наноструктур — карбиноидов. В результате реакции дегидрофторирования (ДГФ) происходит отщепление атомов фтора и водорода от углеродного скелета и удаление их в виде молекул HF [2].

Образовавшиеся в результате реакции ДГФ незамкнутые углеродные связи образуют парамагнитные центры (ПЦ). Разрушение этих ПЦ может происходить различными путями, например, два соседних атома углерода в цепи могут образовать кратную углерод–углеродную связь; незамкнутая связь может присоединить к себе молекулу, находящуюся в атмосфере воздуха (ОН, СО и т.п.); углерод– углеродная связь может возникнуть между двумя соседними цепями. Изучение этих процессов является актуальным. Исследуя кинетику разрушения ПЦ в разных условиях, можно исключать некоторые из этих механизмов разрушения радикалов и совершенствовать методику контролируемого синтеза карбиноидов.

Данная работа посвящена сравнительному исследованию кинетики разрушения ПЦ при хранении химически дегидрофторированного ПВДФ при атмосферном давлении и в условиях ограниченного доступа воздуха.

Для исследования были выбраны образцы ПВДФ марки Ф–2М исходной толщиной 60 мкм, произведенные ОАО «Пластполимер» г. Санкт–Петербург. Исходная пленка подвергалась химическому ДГФ в смеси, состоящей из насыщенного раствора КОН в этаноле (1 часть) с ацетоном (9 частей) [3]. Было приготовлено несколько образцов с продолжительностями ДГФ 15 и 18 часов. Для ограничения доступа воздуха к исследуемым образцам производилось запечатывание их в кварцевые пробирки при помощи восковой пробки. Запечатывая пробирку в разных местах, можно было изменять объём ограниченного воздушного пространства и концентрацию в нём молекул. Для образцов с продолжительностью синтеза 15 часов было проведено 3 эксперимента с различным объёмом ограниченного воздушного пространства.

В результате проведенных экспериментов было выявлено, что кинетика зависимости разрушения ПЦ зависит от конечного положения восковой пробки внутри пробирки.

Работа выполнена в рамках государственного задания министерства образования и науки Российской федерации в сфере научной деятельности (НИР № 2531 «Синтез и свойства магнитоактивного слоя на поверхности пленки поливинилиденфторида (ПВДФ)»).

1. Кочервинский В.В., Успехи химии **65** (10), 936 (1996).

2. Evsyukov S.E., Chemical dehydrohalogenation of polymers. Carbyne and Carbynoid Structures. Kluwer Academic Publishers (1999).

3. Кудрявцев Ю.П., Евсюков С.Е., Бабаев В.Г., Изв. АН СССР, Сер. хим. 5, 1223 (1992).

# Халькогениды железа Fe<sub>7</sub> $X_8$ (X = S, Se): влияние замещения железа титаном и кобальтом на структуру и магнитные свойства

Ибрахим П.Н.Г.<sup>1\*</sup>, Селезнева Н.В.<sup>1</sup>, Волегов А.С.<sup>1</sup>, Баранов Н.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: peteribrahim@yandex.ru

Сульфид железа  $Fe_7S_8$  и селенид железа  $Fe_7Se_8$  обладают слоистой сверхструктурой типа NiAs с упорядочением вакансий в чередующихся металлических слоях. Из-за наличия вакансий антиферромагнитное взаимодействие между ферромагнитно упорядоченными слоями приводит к ферримагнетизму при температурах ниже 590 К и 480 К в соединениях  $Fe_7S_8$  и  $Fe_7Se_8$  [1] соответственно.



Рис. 1. Относительное изменение температуры Нееля ( $T_{\rm N}/T_{\rm N_0}$ ) и намагниченности ( $M/M_0$ ) от концентрации титана или кобальта (y) в соединениях Fe<sub>7-y</sub> $M_yX_8$ .

В настоящей работе представлены результаты исследования изменений кристаллической структуры и магнитных свойств при замещении железа в соединениях Fe<sub>7</sub>X<sub>8</sub> атомами титана и кобальта. Методом твердофазного ампульного синтеза в вакуумированных кварцевых ампулах синтезированы четыре серии соединений Fe<sub>7-y</sub> $M_yX_8$  (M = Co, Ti; X = S, Se). Аттестация образцов выполнялась с помощью дифрактометра BRUKER D8 ADVANCE. Магнитные измерения полученных образцов проводились на СКВИД-магнитометре и на вибромагнитометре в температурном интервале 2–1000 К.

Установлено, что все образцы обладают различными сверхструктурами типа NiAs. Замещение железа как кобальтом, так и титаном приводит к монотонному снижению температуры Нееля *T*<sub>N</sub> (как видно на рис. 1). Однако изменение намагниченности при замещении зависит от сорта замещающего атома. В случае замещения железа кобальтом намагниченность монотонно уменьшается с ростом содержания кобальта, что свидетельствует о равновероятном замещении в слоях железа. В случае замещения железа титаном в системах Fe<sub>7-v</sub>Ti<sub>v</sub>X<sub>8</sub> обнаружено немонотонное изменение намагниченности. При концентрации титана  $\gamma = 1$  намагниченность минимальна, соединение Fe<sub>6</sub>TiS<sub>8</sub> проявляет антиферромагнитное поведение. Образцы Fe<sub>4</sub>Ti<sub>3</sub>S<sub>8</sub> и Fe<sub>3</sub>Ti<sub>4</sub>S<sub>8</sub> обладают почти в 2 раза большей намагниченностью по сравнению с незамещенным соединением Fe<sub>7</sub>S<sub>8</sub>. Немонотонный характер изменения объясняется неравновероятным замещением железа титаном в соседних металлических слоях [2].

Настоящая работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 13–02–00364), а также Программы УрО РАН (проект № 12–Т–2–1012).

- 1. Wang H., Salveson I., Phase transition 78, 547 (2005).
- 2. Ibrahim P.N.G. et al., Solid State Sciences 24, 26 (2013).

# Исследование магнитных свойств двухфазных микропроводов при высоких температурах

<u>Иглесиас И.</u><sup>1\*</sup>, Эл Каммуни Р.<sup>2</sup>, Чичай К.А.<sup>1</sup>, Родионова В.В.<sup>1,3</sup>, Баскес М.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия <sup>2</sup>Мадридский институт материаловедения, Мадрид, Испания <sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия \*e-mail: ireneiglesias.27@gmail.com

В последние годы активно изучается процесс перемагничивания магнитно-двухфазных микропроводов при комнатной температуре. Процесс перемагничивания магнитно-двухфазного микропровода происходит в два этапа. В первую очередь перемагничивается магнитно более мягкая фаза, во вторую — магнитно более твердая. Особенности процесса перемагничивания отражаются на виде петли гистерезиса образцов. Петли гистерезиса магнитно-двухфазных микропроводов имеют ступенчатый вид. Несмотря на то, что большинство устройств предназначены для работы при комнатной температуре, их технологическое применение возможно расширить до более широкого температурного диапазона, в частности выше комнатной температуры [1]. В связи с этим важно проанализировать зависимость магнитных свойств двухфазных микропроводов (намагниченность насыщения, форма петель гистерезиса, восприимчивость, коэрцитивная сила) от температуры, что и является целью данной работы. В этой работе мы исследовали, анализировали и сравнили две серии полностью покрытых двухфазных микропроводов с различной толщиной магнитотвердой или магнитомягкой оболочки. Ферромагнитные двухфазные микропровода были изготовлены комбинированными методами вытягивания из расплава и электроосаждения [2]. Используя первый метод, были изготовлены однофазные микропровода в стеклянной оболочке (в дальнейшем керн), состав которых следующий:  $(Co_{0.94}Fe_{0.06})_{72.5}Si_{12.5}B_{15}$  ( $\lambda_s \sim 0$ ,  $\lambda_s$  — константа магнитострикции) и Fe<sub>77.5</sub>Si<sub>7.5</sub>B<sub>15</sub> ( $\lambda_s > 0$ ). Диаметры металического керна d = 8 мкм и d = 12 мкм соответственно. Затем вторая (внешняя) магнитомягкая фаза (оболочка из Co<sub>90</sub>Ni<sub>10</sub> или Fe<sub>20</sub>Ni<sub>80</sub>) была электроосаждена на однофазные микропровода. Толщина оболочки варьируется от 1 мкм до 4 мкм (регулируется временем электроосаждения) [2]. Длина образцов с оболочкой CoNi — 4.5 мм, длина образцов с оболочкой FeNi — 4 мм. Измерения образцов микропроводов проводились на вибрационном магнитометре фирмы Lake Shore в температурном диапазоне от 295 К до 1200 К. В результате исследований было определено, что магнитные свойства образцов изменяются при изменении толщины оболочки — увеличение толщины оболочки приводит к увеличению коэрцитивной силы. Также большое влияние на магнитные свойства образцов оказывает выбор материала оболочки: большая коэрцитивная сила наблюдалась у образцов с оболочкой из CoNi. Выбор материала керна также имеет существенное влияние: керн из сплава на основе СоFе имеет практически безгистерезисное поведение, типичное для микропроводов с отрицательной магнитострикцией, керн из сплава на основе Fe проявляет бистабильное магнитное поведение, типичное для микропроводов с положительной магнитострикцией. Коэрцитивная сила керна из сплава на основе Fe больше, нежели коэрцитивная сила керна из сплава на основе CoFe. Также было исследовано изменение коэрцитивной силы образцов при увеличении температуры: коэрцитивная сила оболочки убывает при увеличении температуры, в то время как коэрцитивная сила керна остается неизменной.

1. Vazquez M., Chiriac H., Zhukov A., Panina L., Uchiyama T., Physica Status Solidi A **208**(3), 493 (2011).

 Pirota K., Hernandez–Velez M., Navas D., Zhukov A., Vazquez M., Advanced Functional Materials 14(3), 266 (2004).

# Магнитные свойства и структура нестехиометрических сплавов $GdNi_2Mn_x$

<u>Инишев А.А.<sup>1\*</sup>, Герасимов Е.Г.<sup>2</sup>, Мушников Н.В.<sup>2</sup>, Терентьев П.Б.<sup>2</sup>, Гавико В.С.<sup>2</sup></u>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: alexsashkane@mail.ru

Обнаружены новые соединения  $RNi_2Mn$  (R = Tb, Dy, Ho, Er), обладающие структурой типа MgCu<sub>2</sub>, несмотря на то, что стехиометрия R и 3d переходных металлов в них составляет 1:3 [1].

В нашей работе исследованы структура, магнитные и магнитотепловые свойства нестехиометрических сплавов  $GdNi_2Mn_x$ . Установлено, что соединения  $GdNi_2Mn_x$  с кубической структурой фазы Лавеса  $MgCu_2$  существуют до концентрации марганца x < 0.4. При концентрации марганца  $x \ge 0.4$  в сплавах  $GdNi_2Mn_x$  наблюдается смесь кубической  $MgCu_2$  и ромбоэдрической  $PuNi_3$  фаз, и относительное содержание фазы со структурой  $MgCu_2$  и содержание марганца в ней уменьшается с ростом x в сплаве.

Обнаружено, что температура Кюри  $T_{\rm C}$  тройных соединений GdNi<sub>2</sub>Mn<sub>x</sub> существенно превосходит  $T_{\rm C}$  бинарных. Температура Кюри постепенно растет с увеличением содержания Mn и достигает 190 K для сплава GdNi<sub>2</sub>Mn<sub>0.4</sub>, что в 2.4 раза выше, чем значение  $T_{\rm C}$  = 80 K для бинарного соединения GdNi<sub>2</sub>, и в 2.2 раза выше, чем температура Нееля  $T_{\rm N}$  = 86 K для бинарного соединения GdMn<sub>2</sub>, что связано с усилением Gd — Ni, Gd — Mn и Mn — Ni обменных взаимодействий.

Результирующий магнитный момент сплавов уменьшается с ростом концентрации марганца, то есть магнитные моменты 4 *f* и 3*d* элементов в соединениях GdNi<sub>2</sub>Mn<sub>x</sub> упорядочены антипараллельно друг другу. Показано, что добавление Mn приводит к сильному изменению магнитного момента Ni в соединении. Так, для сплавов GdNi<sub>2</sub>Mn<sub>x</sub> уже небольшое добавление Mn резко увеличивает магнитный момент Ni от 0.23  $\mu_B$  в соединении с *x* = 0 до значения 0.5–0.58  $\mu_B$  в соединении с *x* = 0.1, близкого к значению магнитного момента чистого никеля.

На основе анализа результатов магнитных измерений нами был определен магнетокалорический эффект. Для соединения GdNi<sub>2</sub>Mn<sub>0.4</sub> максимальное изотермическое изменение энтропии в диапазоне изменения магнитного поля от 0 до 90 кЭ составляет  $\Delta S = 4.6$  Дж·К/кг, что почти в два раза меньше, чем у чистого Gd, где  $\Delta S = 8.5$  Дж·К/кг при изменении магнитного поля от 0 до 50 кЭ. Однако максимальное изменение энтропии по сравнению чистым Gd имеет место в гораздо более широком диапазоне температур, что является важным для практического применения термомагнитных устройств.

Работа выполнена при частичной поддержке грантами РФФИ (проекты №№ 13–02–96022\_р\_урал и 15–02–05681).

1. Wang J.L., Marquina C., Ibarra M.R., Wu G.H., Phys. Rev. B 73, 094436 (2006).

# Измерение намагниченности материалов в сильных магнитных полях при адиабатических условиях

Каманцев А.П.<sup>1,2\*</sup>, Коледов В.В.<sup>1,2</sup>, Дильмиева Э.Т.<sup>1</sup>, Маширов А.В.<sup>1</sup>, Шавров В.Г.<sup>1</sup>, F. Guillou<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия <sup>2</sup>Международная лаборатория сильных магнитных полей и низких температур ПАН, Вроцлав, Польша

<sup>3</sup>Делфтский технический университет, Дельфт, Нидерланды

\*e-mail: kaman4@gmail.com

Основное уравнение термодинамики (закон сохранения энергии) для бесконечно малых обратимых процессов в применении к магнетикам с учетом изменения их магнитного состояния (для единицы объема) имеет вид:  $dU = TdS + \mu d\rho + HdM$ , где dU — изменение плотности полной энергии, dS— изменение плотности энтропии,  $d\rho$  — изменение плотности магнетика,  $\mu$  — химический потенциал и T — абсолютная температура. Последнее слагаемое в правой части равно работе магнитных сил. При адиабатически–изохорном процессе (dS = dV = 0) и при  $d\rho = 0$  эта величина равна изменению полной энергии магнетика: dU = HdM [1].



Рис. 1. Температурная зависимость намагниченности образца MnFe(P,Si) в магнитном поле 2 Тл: 1) измеренная при помощи датчиков Холла в адиабатических условиях — черная кривая; 2) измеренная при помощи MPMS магнитометра — красная кривая.

Для расчета работы магнитного поля была предложена простая экспериментальная установка для измерения температурной и полевой зависимостей намагниченности магнетиков при адиабатических условиях. Изготовлена вставка для Биттеровского магнита (поле до 14 Тл) — вакуумный калориметр, в камеру которого помещается образец в пластиковой рамке, что обеспечивает адиабатичность условий измерения. Температура образца измерялась при помощи платинового терморезистора. Характерное время температурной релаксации образца в такой системе около 300 с. Измерение намагниченности проводилось при помощи двух датчиков Холла ПХЭ602118В, один из которых располагался на «экваторе», а другой — на «полюсе» образца, перпендикулярно магнитным силовым линиям. Разность показаний двух датчиков и есть полезный сигнал, пропорциональный намагниченности образа в поле.

Кроме измерения намагниченности магнетиков установка позволяет изучать магнитокалорический эф-

фект (МКЭ) в магнитном поле до 14 Тл при адиабатических условиях. Получение этих данных одновременно позволяет рассчитать работу магнитного поля по намагничиванию/размагничиванию образца *HdM* и решить проблему расчета МКЭ в магнетиках с разными видами магнитных фазовых превращений. На рис. 1 для примера представлены кривые температурных зависимостей намагниченности образца MnFe(P, Si) в поле 2 Тл, полученные в адиабатических и изотермических условиях.

1. Вонсовский С.В., Магнетизм, Наука (1971).

### Магнитные фазовые переходы в сплавах $Tm_2Fe_{17-x}Mn_x$

<u>Кучин А.Г.<sup>1</sup>\*, Платонов С.П.<sup>1</sup>, Терентьев П.Б.<sup>1</sup>, Королев А.В.<sup>1</sup>, Волегов А.С.<sup>2</sup>, Габай А.М.<sup>1</sup>, Макарова Г.М.<sup>1</sup></u>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: sppsg@yandex.ru

В данной работе исследованы магнитные свойства системы сплавов  $\text{Tm}_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$ , x = 0, 0.2, 0.5, 1, 1.5. Ранее было показано [1], что, в отличие от других сплавов  $R_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$ , в системе  $\text{Lu}_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$  увеличение содержания Mn в сплаве приводит не к уменьшению, а к увеличению  $T_c$ . В нашей работе методами магнитных измерений монокристаллов показано сходное системе  $\text{Lu}_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$  поведение системы  $\text{Tm}_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$ : ферромагнетик  $\text{Tm}_2\text{Fe}_{17}$ , переходящий в антиферромагнитное состояние при T > 240 K [2], становится ферромагнитным во всей области температур уже при малом замещении атомов Fe на Mn ( $\text{Tm}_2\text{Fe}_{16.8}\text{Mn}_{0.2}$ ), а дальнейшее увеличение содержания Mn ведет к усилению положительных обменных взаимодействий в сплаве и росту  $T_c$ . Этот эффект, по–видимому, обусловлен разупорядоченной кристаллической структурой соединений  $\text{Tm}_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$  типа  $\text{LuFe}_{9.5}$  [3]. В такой структуре «гантельные» пары атомов Fe, в которых отрицательное обменное взаимодействие между атомами наиболее сильное, помимо позиции 4f, занимают дополнительную «дефектную» позицию 4e [2]. Атомы Mn, предположительно, замещают Fe в этих позициях, что вызывает ослабление энергии отрицательных обменных взаимодействий в сплаве [4].



Рис. 1. Зависимость M(H) вдоль оси *а* при T = 4 К для монокристаллов  $\text{Tm}_2\text{Fe}_{17-x}\text{Mn}_x$ .

Для всех сплавов системы  $Tm_2Fe_{17-x}Mn_x$ вблизи T = 100 К характерен спонтанный спинпереориентационный (СП) магнитный фазовый переход [4], вызванный конкуренцией анизотропий типа «легкая ось» и «легкая плоскость» для Tm– и Fe– подсистем соответственно [5,6]. Температура СП перехода возрастает с ростом содержания Mn.

При намагничивании монокристаллов  $Tm_2Fe_{17-x}Mn_x$ , x = 0 [6], 0.2, 0.5 вдоль оси трудного намагничивания *а* при T = 4 К имеет место индуцированный полем СП переход первого рода (FOMP) (Рис. 1). Критическое поле перехода монотонно возрастает с ростом содержания Mn. В случае  $Tm_2Fe_{17-x}Mn_x$ , x = 1, 1.5 подобный переход не проявляется.

Данная работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Магнит» РФФИ (управит № 12.02.00256)

№ 01201463328 (проект № 12–Т–1012) при поддержке РФФИ (проект № 13–02–00256).

- 1. Kuchin A.G., Iwasieczko W., Drulis H., Khrabrov V. I., Solid State Commun. 146, 446 (2008).
- 2. Kuchin A.G., Platonov S.P., Korolyov A.V. et al., J. All. Com. **599**, 26 (2014).
- 3. Givord D., Lemaire R., Moreau J.M., Roudaut E., J. Less-Common Met. 29, 361 (1972).
- 4. Kuchin A.G., Gabay A.M., Makarova G.M et al., Solid State Phenomena 215, 123 (2014).
- 5. Givord D., Lemaire R., IEEE Trans. Magn. MAG-10, 109 (1974).
- 6. Park J., Jo Y., Park J.-G., Prokeš K. et al., JMMM 237, 158 (2001).
### Намагниченность гетероструктур на основе GaAs с низким содержанием марганца

Луговых А.М.<sup>1</sup>\*, Чарикова Т.Б.<sup>1</sup>, Окулов В.И.<sup>1</sup>, Губкин А.Ф.<sup>1</sup>, Моисеев К.Д.<sup>2</sup>, Неведомский В.Н.<sup>2</sup>, Кудрявцев Ю.А.<sup>3</sup>, Галлардо С.<sup>3</sup>, Лопес М.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия <sup>3</sup>Национальный политехнический институт, Мехико, Мексика \*e-mail: alugovih@el.ru

Разбавленные магнитные полупроводники (РМП) и гетероструктуры на их основе привлекают особое внимание как системы, объединяющие в себе два направления в физике конденсированного состояния: полупроводниковая проводимость и магнетизм [1]. Возможность использования многообразия свойств этих систем приведет к созданию новых приборов полупроводниковой спинтроники. Методом молекулярно–пучковой эпитаксии на монокристаллической подложке GaAs(001) получены 2 вида гетероструктур, содержащих одиночную квантовую яму на основе твердого раствора In<sub>0.16</sub>Ga<sub>0.84</sub>As. При этом в первом случае атомарный марганец распределен случайным образом в матрице нелегированного GaAs, в гетероструктуре второго типа δ–слой атомарного Mn в матрице нелегированного GaAs расположен в интервале расстояний 2–5 нм от квантовой ямы In<sub>0.16</sub>Ga<sub>0.84</sub>As и на глубине 20–50 нм от поверхности образца. Эпитаксиальное наращивание осуществлялось в едином процессе в одной ростовой камере (RiberC–21) с применением комбинированной методики обычной молекулярно–пучковой эпитаксии и способа низкотемпературной эпитаксиальной миграции.

Были измерены зависимости магнитного момента *m* от внешнего магнитного поля *H* для двух типов гетероструктур GaAs/InGaAs/GaAs/GaAs/Ga(Mn)As и GaAs/InGaAs/GaAs/δ-Mn(0.5 ML - 0.5 атомного слоя)/GaAs с помощью SQUID-магнитометра (MPMS Quantum Design) в диапазоне температур T =(1.8 ÷ 300) К и магнитных полях до 50 кЭ (Институт физики металлов УрО РАН). После учета диамагнитного вклада от подложки в общую массовую (или удельную) намагниченность  $\sigma(H)$  образца было получено, что при температуре T = 5 K, когда внешнее магнитное поле приложено вдоль легкой магнитной оси, намагниченность гетероструктуры Ga(Mn)As увеличивается с ростом магнитного поля и насыщается в поле  $H \approx 10$  к $\exists$  ( $\sigma \approx 6 \cdot 10^{-4}$  ед. СГСМ/г). Нам удалось оценить молярную долю Mn в слое Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>As, которая составила  $x \approx 0.002$ . Это соответствует пределу разбавления магнитных атомов в полупроводнике [2]. Более того, в интервале  $H = (-1 \div +1)$  кЭ мы наблюдали петлю гистерезиса массовой намагниченности в зависимости от приложенного внешнего магнитного поля. Таким образом, впервые был обнаружен ферромагнетизм в гетеростуктурах на основе GaAs при столь низком содержании марганца. Некоторое увеличение намагниченности без явного насыщения в магнитном поле H = 10 кЭ наблюдалось и при температуре T = 300 К. Для гетероструктур GaAs с  $\delta$ -слоем (0.5 ML) марганца намагниченность при T = 5 К в поле  $H \approx 10$  кЭ была существенно слабее и составляла  $\sigma \approx 1.4 \cdot 10^{-4}$  ед. СГСМ/г. В случае гетероструктур с б–слоем Мп увеличение намагниченности может быть достигнуто за счет совершенствования технологии выращивания δ–слоя.

Работа выполнена по Программе фундаментальных исследований Президиума РАН (Проект № 12– П–2–1018 УрО РАН), при частичной поддержке РФФИ (грант № 12–02–00202), SENER, CONACYT (Мексика, грант № 152244).

1. Dietl T., Ohno H., Matsukara F., IEEE Trans. on Electron Devices 54, 945 (2007).

2. Furdyna J.K., J. of Appl. Phys. 64, R29 (1988).

### Магнитные свойства и ферромагнитный резонанс наночастиц оксида железа и биокомпозитов на их основе

<u>Новоселова Ю.П.</u><sup>1\*</sup>, Курляндская Г.В.<sup>1</sup>, Саматов О.М.<sup>2</sup>, Сафронов А.П.<sup>1,2</sup>, Бекетов И.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: novoselovajp@qmail.com

Магнитные наночастицы (МНЧ) оксида железа различной стехиометрии были синтезированы методом лазерного испарения (ЛИ). На их основе были приготовлены устойчивые водные суспензии (путем сепарирования, деагрегирования и введения стабилизатора). Для создания биокомпозитов использовались непатогенные штаммы красных и черных дрожжей Exophiala, выделенные из озера Байкал и выращенные на питательной среде с добавлением и без добавления водных суспензий оксида железа (контрольная группа). Особенности структуры образцов исследовались с помощью рентгено-фазового анализа, электронной и оптической микроскопии. Магнитные свойства были измерены с использованием вибрационного и СКВИД магнитометров. При комнатной температуре были отмечены низкие значения коэрцитивной силы и остаточной намагниченности, а магнитное поведение МНЧ удалось описать в рамках модели «ферримагнитное ядро-оболочка» [1]. Петли магнитного гистерезиса биокомпозитов при комнатной температуре по форме были достаточно близки к тому, что наблюдалось для МНЧ высушенной суспензии (рис. 1(а)). Несколько более быстрое приближение к насыщению для случая биокомпозитов позволяет предположить наличие взаимодействия между МНЧ или их агрегирование в биокомпозите. Измерения ферромагнитного резонанса (ФМР) были проведены на стандартном микроволновом спектрометре ER 049X. В клетках дрожжей, выращенных на гелевой среде, был обнаружен электронный парамагнитный сигнал, который указывает на наличие свободного радикала. Данный сигнал был также обнаружен в образцах черных дрожжей, выращенных на гелевой среде в присутствии МНЧ. Положение линии ФМР (резонансное поле  $H_{\rm res} = 3.1$  кЭ) достаточно хорошо совпало с величиной, ожидаемой для сферических частиц магнетита (рис. 1(б)). Небольшой сдвиг *H*<sub>res</sub> в сторону меньших полей в случае МНЧ, высушенных из суспензии, можно объяснить ролью диполь-дипольного взаимодействия между МНЧ.



Рис. 1. (а) — приведенная зависимость намагниченности от приложенного магнитного поля МНЧ оксида железа (MNP) и биокомпозита (MNP+yeast) на его основе (см. врезку); (б) — спектры ФМР для ЛИ МНЧ (powder), а также МНЧ, полученных из суспензии на их основе (ff).

Работа выполнена при финансовой поддержке CRDF и УрО РАН в рамках гранта RUE2–7103–EK–13. 1. Safronov A.P., Beketov I.V. et al., AIP Advances **3**(1), 052135 (2013).

### Магнитосопротивление ферромагнитных фаз высокого давления $(GaSb)_2M$ (M = Cr, Mn)

Пронин А.А.<sup>1</sup>\*, Кондрин М.В.<sup>2</sup>

#### <sup>1</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова, Москва, Россия <sup>2</sup>Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Россия \*e-mail: apronin@hotmail.com

Синтез новых магнитных материалов на основе полупроводников группы  $A_3B_5$  с магнитными ионами в качестве допирующего элемента считается одним из перспективных направлений современной спинтроники [1]. К основному преимуществу материалов данного класса относится совместимость с существующими технологиями микроэлектронной промышленности. Наиболее хорошо изучены так называемые разбавленные магнитные полупроводники (DMS), получаемые, как правило, методами неравновесного эпитаксиального наращивания [1].



Рис. 1. Температурные зависимости намагниченности (треугольники), нормализованных магнитной восприимчивости  $\chi/\chi_{max}$  (крестики) и амплитуды линейного члена полевой зависимости магнитосопротивления (кружки) у (GaSb)<sub>2</sub>Mn.

Однако предельная концентрация магнитных примесей у таких плёночных образцов не превышает 5–10%, а температура Кюри ( $T_c$ ) оказывается существенно ниже комнатной, что принципиально ограничивает их практическое использование. Значительно большие значения концентрации магнитных примесей и, соответственно,  $T_c$ порядка комнатной могут быть получены у материалов на основе недавно синтезированных фаз высокого давления (GaSb)<sub>2</sub>M (M = Cr, Mn) [2].

Ранее были подробно исследованы магнитные и структурные характеристики данных систем (см. [2] и цитированную литературу), в то время как наиболее интересной характеристикой с точки зрения приложений спинтроники является магнитосопротивление (МС) при высоких температурах. Получение этих данных и являлось основной целью настоящего исследования [3].

Было установлено, что MC у образцов  $(GaSb)_2M$  содержит несколько вкладов,

причём близкое к линейному отрицательное МС преобладает при температурах выше нескольких десятков К, а его амплитуда демонстрирует максимум в окрестности  $T_c$  (рис. 1). Наибольшие абсолютные значения МС оказались равны ~2% для (GaSb)<sub>2</sub>Cr и ~0.5% для (GaSb)<sub>2</sub>Mn.

1. Matsukura F., Ohno H., Dietl T., Handbook of Magnetic Materials, Amsterdam: Elsevier (2002).

- 2. Kondrin M.V. et al, J. Phys.: Condens. Matter 23, 446001 (2011).
- 3. Pronin A.A. et al, J. Phys.: Condens. Matter 26, 326001 (2014).

### Расчет магнитных свойств сплавов Fe–Al на основе спин–флуктуационного подхода

Радзивончик Д.И.<sup>1</sup>\*, Гребенников В.И.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: radzivonchik@imp.uran.ru

Один из возможных подходов в описании магнетизма сплавов переходных и нормальных металлов основывается на теории динамических флуктуаций электронной спиновой плотности [1]. Спиновые флуктуации рассматриваются в системе коллективизированных 3d-электронов с сильным внутриатомным обменным взаимодействием  $-u_t s_t^2$  ( $s_t$  — оператор спина электронов,  $u_t$ — константа внутриатомного взаимодействия узла типа t). Затем система с парным взаимодействием электронов с помощью преобразования Стратоновича-Хаббарда заменяется эквивалентным образом системой электронов, находящихся в обменных полях  $V_t$ , флуктуирующих в пространстве и во времени. Нововведением рассматриваемой задачи по сравнению со стандартной теорией флуктуирующего поля [2] в магнетиках является наличие нескольких типов узлов с разным взаимодействием  $u_t$  и концентрацией  $c_t$ . Получена система уравнений для определения среднего значения поля  $V_t$  и электронного спинового момента  $\bar{s}_t$  для разных типов узлов.



Рис. 1. Температурное поведение намагниченности при параметрах  $u_1 = 0.118W$ ,  $u_2 = 0.144W$ ,  $c_1 = 0.47$ ,  $c_2 = 0.53$ , где W = 8.8 eV — ширина *d*-зоны. Кривые 1 и 2 — намагниченность соответственно первого и второго типов узлов; 3 — полная намагниченность  $(c_1\bar{s}_1 + c_2\bar{s}_2)$ ; 4 — обратная восприимчивость.

Величина спина задается интегралом по энергии от мнимой части одноузельной «примесной» функции Грина, усредненной по флуктуациям обменного поля.

Предложенный подход демонстрируется на примере сплавов Fe – Al при концентрациях 25-35 ат.%Al. В зависимости от ближайшего окружения атомы железа могут отличаться между собой разными константами внутриатомного взаимодействия. В работе модель сплава была рассмотренна на основе двух типов атомов железа (два типа узлов). Самосогласованное решение системы уравнений позволило вычислить зависимость намагниченности от температуры, значение температуры Кюри, восприимчивость, величину эффективного магнитного момента, теплоемкость и энтропию. На рис. 1 представлен пример рассчитанных намагниченностей (полной и для двух типов узлов) и обратной восприимчивости для указанных параметров *u<sub>t</sub>* и *c<sub>t</sub>*. Вычисленные намагниченности для рассматриваемых концентраций атомов алюминия описывают экспериментальные данные в работе [3].

Работа выполнена при поддержке Проекта Президиума РАН 12-П-2-1041.

- 1. Melnikov N.B., Grebennikov V.I. et al., J.Math.Theor. 43, 195004 (2010).
- 2. Moriya T., Spin Fluctuation in Itinerant Electron Magnetism, Springer (1985).
- 3. Voronina E.V., Elsukov E.P., Godovikov S.K. et al., The Physics of Metals and Metallography 109(5), 417 (2010).

### Солитоны в поле нелинейной волны намагниченности в квазиодномерном ферромагнетике

Киселев В.В., Расковалов А.А.\*

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: raskovalov@imp.uran.ru

Одномерные солитоны на фоне однородного основного состояния в квазиодномерном ферромагнетике с легкоосной анизотропией хорошо изучены [1]. Они делятся на доменные стенки и их связанные состояния — бризеры. Бризеры при определенных значениях параметров можно трактовать как уединенные домены — зародыши перемагничивания материала.

Вместе с тем уравнение Ландау–Лифшица для квазиодномерного ферромагнетика с анизотропией типа «легкая ось» полностью интегрируемо, а потому имеет явные солитонные решения и в случае, когда фон неоднороден, — например, если образец находится в поле нелокализованной нелинейной волны накачки не малой (большой) амплитуды. Однако, поскольку уравнение Ландау–Лифшица сильно нелинейно, поиск солитонов на таком фоне требует применения специальной процедуры интегрирования — метода «одевания» (модификации метода обратной задачи рассеяния).

В работах [2–5] этим методом построено аналитическое решение, описывающее взаимодействие нелинейной волны накачки большой амплитуды с бризером и, в частности, с уединенным доменом. Показано, что нелинейная волна накачки при прохождении через уединенный домен приобретает специфический фазовый сдвиг, что может быть использовано для экспериментального обнаружения уединенного домена [3,4]. Кроме того, нами аналитически описано взаимодействие нелинейной волны с отдельной доменной стенкой. Такая задача впервые рассматривалась в работе [6], но, к сожалению, приведенное там решение содержало неточности. Нами исправлены формулы работы [6]. Показано, что под действием волны накачки изменяется внутренняя структура доменной стенки. Установлено, что как доменная стенка, так и уединенный домен в поле волны начинают двигаться навстречу волне, причем с одной и той же скоростью. Получена бесконечная серия интегралов движения (в частности энергия и импульс), наличие которых обеспечивает стабильность солитонов на фоне волны.

К настоящему времени мы дополнили результаты работ [2–5] исчерпывающим анализом поведения бризеров (уединенных доменов) в поле волны накачки. В общем случае бризер имеет собственные внутренние колебания и может двигаться по образцу даже в отсутствие волны, что осложняет его анализ. Нами исследованы условия, при которых волна накачки разрушает бризер, предсказаны возможности формирования локализованных колебаний вблизи границ его устойчивости. Установлено, что скоростью движения доменных стенок, уединенных доменов и областей локализации колебаний можно управлять, меняя волновое число и амплитуду волны накачки. Показано, что подобные колебания могут проявлять себя как кратковременные, но сильные всплески модуляций волны накачки, что по характеру напоминает формирование «волн–убийц» в океанологии.

- 1. Косевич А.М., Иванов Б.А., Ковалев А.С., Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны, Наукова думка (1983).
- 2. Киселев В.В., Расковалов А.А., ТМФ **163**, 94 (2010).
- 3. Киселев В.В., Расковалов А.А., ФММ **109**, 625 (2010).
- 4. Киселев В.В., Расковалов А.А., ФНТ 36, 827 (2010).
- 5. Kiselev V.V., Raskovalov A.A., Chaos, Solitons & Fractals 45, 1551 (2012).
- 6. Яремчук. А.И., ТМФ **69**, 153 (1985).

## Исследование магнитной восприимчивости нанокристаллического сплава системы Nd–Fe–B

Сысолятина Л.В.\*, Волегов А.С., Болячкин А.С.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: larisa-sysolyatina77@yandex.ru

Магнитные материалы системы Nd – Fe – В вблизи состава фазы Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B при нормальных условиях имеют значение энергетического произведения  $(BH)_{\rm max}$ , наибольшее из всех известных промышленно–выпускаемых магнитных материалов (до 50 МГсЭ и выше). Это позволяет широко применять постоянные магниты на их основе в различных технологических приложениях.

Дальнейшее развитие постоянных магнитов во многом связывают с точноконтролируемым наноструктурным состоянием и, в частности, созданием нанокомпозитов на основе фаз разнородной магнитной твердости [1]. Для достижения этого требуется развитие методик оценки микроскопических параметров и констант в данных средах, в том числе описывающих межзеренное взаимодействие. Так, G. Zimmermann указал на возможность данной оценки при измерении поперечной магнитной восприимчивости при варьировании состояния остаточной намагниченности образцов [2].

В данной работе выполнены эксперименты по измерению продольной и поперечной (направления первоначального намагничивания образца) магнитных восприимчивостей нанокристаллического сплава системы Nd – Fe – В при температуре T = 300 К. Указанные восприимчивости измерялись в состоянии остаточной намагниченности, которое формировалось и зависело от отрицательного внешнего магнитного поля, приложенного к предварительно намагниченному до технического насыщения образцу.

На основе полученных результатов были оценены константа межзеренного обменного взаимодействия  $J_{\text{IEI}} = 11 \pm 1$  эрг/см<sup>2</sup> и эффективная константа одноосной магнитной анизотропии  $K = (2.79 \pm 0.06) \cdot 10^7$  эрг/см<sup>3</sup> в рамках приближения слабой обменной связи частиц ансамбля Стонера-Вольфарта [3]. Значение константы межзеренного обменного взаимодействия в несколько раз меньше, чем таковое в объеме фазы Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B, что объясняется сильной дефектностью межзеренной границы. Снижение значения эффективной константы одноосной магнитной анизотропии по отношению к таковому для монокристаллов Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B может быть объяснено влиянием поверхностной анизотропии — эффект Нееля.

1. Balamurugan B, Selmyer D.J., Hadjipanayis G.C, Skomski R, Scripta Materialia 66, 542, (2012).

- 2. Zimmermann G., J. Appl. Phys 77, 2097 (1995).
- 3. Skomski R., Simple Models of Magnetism, Oxford University Press, (2012).

# Магнитокалорический эффект в интерметаллидах $Gd_{100-x}Y_x$ (x = 0...15), подвергнутых интенсивной пластической деформации

<u>Ульянов М.Н.</u><sup>1\*</sup>, Таскаев С.В.<sup>1,3,4</sup>, Скоков К.П.<sup>2</sup>, Карпенков Д.Ю.<sup>2</sup>, Ховайло В.В.<sup>3</sup>, Батаев Д.С.<sup>1</sup>, Пелленен А.П.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия <sup>2</sup>Тверской государственный университет, Тверь, Россия <sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия <sup>4</sup>Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия \*e-mail: max-39@yandex.ru

Гадолиний традиционно используют в качестве «эталонного» материала в магнитном охлаждении. Как правило, все магнитные и термодинамические свойства новых магнитокалорических (МК) материалов сравнивают со свойствами чистого Gd для получения качественной оценки пригодности использования в технологии магнитного охлаждения. Gd и сплавы на его основе являются одними из лучших материалов для создания прототипов охлаждающих устройств, работающих на МКЭ.

Эта работа посвящена изучению магнитных свойств интерметаллидов  $Gd_{100-x}Y_x$  (x = 0, 5, 10, 15), подвергнутых интенсивной пластической деформации (ИПД). Метод ИПД является многообещающим методом для разработки новых функциональных материалов. В зависимости от степени деформации магнитные, структурные или термодинамические свойства сплавов могут значительно отличаться. Так, например, один из возможных путей создания материалов для технологии магнитного охлаждения тесно связан с подготовкой очень тонких (в несколько микрон) лент с высокими значениями МКЭ и хорошими механическими свойствами.

Как показано в предыдущих работах, ИПД может приводить к значительному изменению магнитных и термодинамических свойств, например, в сильно деформированных образцах чистого Gd [1]. Однако изменение магнитных свойств происходит не во всех материалах — как показали проведенные нами исследования, для многих сплавов 3*d*-металлов не наблюдается сколько-нибудь значительного изменения магнитных характеристик.

МКЭ в холоднокатаных образцах существует в широком интервале температур 258–295 К и сравним с МКЭ, наблюдаемом в недеформированном образце чистого гадолиния. Значение МКЭ в прокатанных образцах уменьшается на 20–50% по сравнению с недеформированными образцами и сильно зависит от степени пластической деформации. МКЭ в деформированных сплавах  $Gd_{100-x}Y_x$  (x = 0, 5, 10, 15) можно восстановить до величин, наблюдаемых на недеформированных образцах, путем высокотемпературного отжига, время и температура которого зависят от степени пластической деформации.

Как показано в работе, холодная прокатка является перспективным методом получения тонких форм магнитокалорических материалов, пригодных для изготовления теплообменников охлаждающих устройств, работающих на магнитокалорическом эффекте.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 12-07-00676-а и гранта Президента МД-770.2014.2.

1. Taskaev S.V., Kuz'min M.D., Skokov K.P., Karpenkov D.Yu., Pellenen A.P., Buchelnikov V.D., Gutfleisch O., JMMM **331**, 33 (2013).

# Магнитокалорический эффект в интерметаллидах $Gd_{100-x}Zr_x$ (x = 0...3), подвергнутых интенсивной пластической деформации

<u>Ульянов М.Н.</u><sup>1\*</sup>, Таскаев С.В.<sup>1,3,4</sup>, Скоков К.П.<sup>2</sup>, Карпенков Д.Ю.<sup>2</sup>, Ховайло В.В.<sup>3</sup>, Батаев Д.С.<sup>1</sup>, Пелленен А.П.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия <sup>2</sup>Тверской государственный университет, Тверь, Россия <sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия <sup>4</sup>Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия \*e-mail: max-39@yandex.ru

Работа посвящена изучению магнитных свойств тонких лент  $Gd_{100-x}Zr_x$  (x = 0, 1, 2, 3), подвергнутых интенсивной пластической деформации (ИПД). Метод ИПД является перспективным для разработки новых функциональных материалов. В зависимости от степени деформации магнитные, структурные или термодинамические свойства могут значительно изменяться. Так, например, один из возможных путей создания материалов для технологии магнитного охлаждения тесно связан с подготовкой очень тонких (в несколько микрон) лент с высокими значениями магнитокалорического эффекта (МКЭ) и хорошими механическими свойствами.

Однако, как показано в предыдущих работах, ИПД может приводить к значительному ухудшению магнитных и термодинамических свойств, например, в сильно деформированных образцах Gd [1]. Это приводит к новым термодинамическим и магнитным свойствам, которые делают материалы неприменимыми для магнитокалорических приложений без дополнительной процедуры термообработки. Режимы термической обработки напрямую связаны со степенью пластической деформации.

В этой работе мы продолжаем наши предыдущие исследования по изучению влияния пластических деформаций на магнитные свойства редкоземельных интерметаллидов, в частности сплавов  $Gd_{100-x}Zr_x$  (x = 0, 1, 2, 3), которые являются простыми и удобными материалами для активного цикла магнитного охлаждения.

Сплавы  $Gd_{100-x}Zr_x$  (x = 0, 1, 2, 3) получены методом аргондуговой плавки и пластически деформированы на четырехвалковом прокатном стане. Величина деформации образцов после многостадийной прокатки находилась в пределах 20–99%. Как показали измерения, температура Кюри линейно уменьшается с увеличением концентрации Zr в интервале 279–295 К. Снижение температуры Кюри связано с уменьшением обменного взаимодействия в материале в результате замещения атомов Gd немагнитными атомами Zr. МКЭ имеет максимум в интервале  $\Delta T_c = 16$  K, однако величина его составляет примерно 50% от величины МКЭ недеформированных сплавов. Улучшение свойств может быть достигнуто последующей термообработкой.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 12-07-00676-а и гранта Президента МД-770.2014.2.

1. Taskaev S.V., Kuz'min M.D., Skokov K.P., Karpenkov D.Yu., Pellenen A.P., Buchelnikov V.D., Gutfleisch O., JMMM **331**, 33 (2013).

# Магнитные свойства низкоразмерных соединений $Li_2Co(WO_4)_2$ и $Li_2Ni(WO_4)_2$

<u>Ушаков А.В.</u><sup>1\*</sup>, Стрельцов С.В.<sup>1</sup>, Мутхуселвам И.П.<sup>2</sup>, Санкар Р.<sup>2</sup>, Нарсинга Рао Г.<sup>2</sup>, Чоу Ф.К.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Национальный университет Тайваня, Тайпей, Тайвань \*e-mail: alexushv@mail.ru



Рис. 1. Схематическое представление возможных путей для обменного взаимодействия в соединении Li<sub>2</sub>Co(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>.

В настоящее время физические свойства низкоразмерных магнетиков широко изучаются в физике конденсированного состояния. Эти системы представляют собой соединения, в кристаллической структуре которых можно выделить обособленные плоскости, цепочки или кластеры. Из–за особенностей кристаллической структуры подобные соединения зачастую являются фрустрированными, то есть основное состояние системы имеет высокую степень вырождения.

В данной работе рассматриваются системы  $Li_2Co(WO_4)_2$  и  $Li_2Ni(WO_4)_2$ , кристаллическая структура которых составлена из плоскостей  $MO_2$  магнитных ионов M (Со или Ni), разделенных ионами лития и вольфрама. В структуре  $Li_2Co(WO_4)_2$  ионы Со находятся в лигандных октаэдрах  $CoO_6$  и образуют треугольную решетку таким образом, что октаэдры  $CoO_6$  имеют об-

щую кислородную вершину в направлении самой короткой связи Со — Со. Интерпретация экспериментальных данных косвенно указывает на то, что соединение Li<sub>2</sub>Co(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> является фрустрированным, и было выдвинуто предположение о возможном обособлении одномерных магнитных цепочек ионов Со вдоль самой короткой связи Со — Со в плоскости CoO<sub>2</sub>. На рис. 1 представлена диаграмма всех возможных направлений обменного взаимодействия в этом соединении.

В данной работе с помощью процедуры Лихтенштейна (LEIP) [1] для модели Гайзенберга были рассчитаны параметры обменного взаимодействия  $J_{ij}$ . В соединении Li<sub>2</sub>Co(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> обменный интеграл  $J_5 = 3$  К (АФМ) является наибольшим по величине и в ~2 раза больше второго по величине параметра  $J_3 = 1.44$  К (АФМ), что позволяет сделать вывод о выделенных одномерных АФМ цепочках вдоль направления  $J_5$ .

Результаты данной работы могут быть полезными для дальнейших экспериментальных и теоретических исследований подобных систем.

Работа выполнена при поддержке грантов РНФ №№ 14–12–00473, 14–22–00004, а также грантов МК № 13–02–00374 и РФФИ № 3443.2013.2.

1. Liechtenstein A.I., Katsnelson M.I., Antropov V.P., Gubanov V.A., Journal of Magnetism and Magnetic Materials **67**, 65 (1987).

# Управление магнитными свойствами и динамикой движения доменной границы в аморфных ферромагнитных микропроводах Со<sub>68.7</sub>Fe<sub>4</sub>Ni<sub>1</sub>B<sub>13</sub>Si<sub>11</sub>Mo<sub>2.3</sub>

<u>Чичай К.А.</u><sup>1\*</sup>, Родионова В.В.<sup>1,2</sup>, Жукова В.<sup>3</sup>, Ипатов М.<sup>4</sup>, Жуков А.<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия <sup>2</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия <sup>3</sup>Университет страны басков, Сан-Себастьян, Испания <sup>4</sup>Баскский научный фонд, Бильбао, Испания \*e-mail: ks.chichay@gmail.com

Аморфные ферромагнитные микропровода в стеклянной оболочке являются очень интересными материалами из–за их необычной микромагнитной структуры и магнитных свойств [1]. Кроме того, на сегодняшний день существует множество способов управления магнитными свойствами и динамикой движения доменной границы (ДГ) в микропроводе. К ним можно отнести отжиг, приложение механических напряжений, изменение соотношения диаметра металлической жилы к полному диаметру микропровода в стеклянной оболочке [2] и другие. Это делает их очень перспективными объектами для систем кодирования, логических устройств и приложений магнитной памяти [1–3].

В данной работе мы изучали влияние отжига и приложенных механических напряжений на магнитные свойства и динамику движения ДГ в аморфных ферромагнитных микропроводов состава  $Co_{68,7}Fe_4Ni_1B_{13}Si_{11}Mo_{2,3}$  в стеклянной оболочке (диаметр металлической жилы d = 17.0 мкм, полный диаметр микропровода D = 23.6 мкм,  $\rho = d/D = 0.72$ ). Образцы были отожжены при температурах 300, 350 и 400°С без приложения каких–либо напряжений и с приложенными напряжениями величиной до 300 MPa в течение различного времени от 5 до 60 минут. Магнитные свойства были изучены индукционным методом как для образцов без обработки, так и для отожженных образцов. Микропровода, не подвергавшиеся обработке, имели петлю гистерезиса S-образной формы, но после отжига микропровода стали бистабильными. Скорость движения ДГ была измерена с помощью метода Сикстуса-Тонкса. При измерении скорости распространения ДГ были приложены различные аксиальные механические напряжения. Впервые было обнаружено, что скорость движения ДГ возрастает при увеличении аксиальных напряжений. В исходно бистабильных микропроводах скорость движения ДГ уменьшается с приложением аксиальных напряжений. Также мы измерили значение коэффициента магнитострикции для изучаемых микропроводов, которое совместно с распределением механических напряжений по радиусу микропровода определяет его микромагнитную структуру [1], и исследовали влияние коэффициента магнитострикции на магнитные свойства отожженных и не подвергавшихся обработке образцов. Было обнаружено изменение знака коэффициента магнитострикции с отрицательного на положительный после отжига, что объясняет изменение микромагнитной структуры и, следовательно, формы петли гистерезиса.

Таким образом, мы изучили магнитные свойства и динамику движения ДГ в микропроводах состава Co<sub>68.7</sub>Fe<sub>4</sub>Ni<sub>1</sub>B<sub>13</sub>Si<sub>11</sub>Mo<sub>2.3</sub>. Мы показали новые возможности управления магнитными свойствами и динамикой движения ДГ, которые могут быть использованы в дальнейшем при разработке приложений.

1. Zhukov A. et al., Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, American Scientific Publishers, V.X (2004).

- 2. Chichay K. et. al., J. Appl. Phys. 113, 17A318 (2013).
- 3. Vazquez M., Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials 4: Novel Materials., John Wiley & Sons, Ltd. (2007).

#### Влияние температуры и времени отжига с приложенными напряжениями на магнитные свойства аморфных ферромагнитных микропроводов

<u>Чичай К.А.</u><sup>1\*</sup>, Родионова В.В.<sup>1,2</sup>, Жукова В.<sup>3</sup>, Ипатов М.<sup>4</sup>, Жуков А.<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия <sup>2</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия <sup>3</sup>Университет страны басков, Сан-Себастьян, Испания <sup>4</sup>Баскский научный фонд, Бильбао, Испания \*e-mail: ks.chichay@gmail.com

Аморфные ферромагнитные микропровода в стеклянной оболочке являются одними из самых перспективных материалов для систем кодирования и приложений магнитной памяти [1]. Для успешной реализации этих устройств необходимо управлять магнитными свойствами микропроводов и динамикой движения доменной границы в них. В магнитно–бистабильных микропроводах (магнитный момент микропровода может находиться в двух стабильных состояниях — в одном из двух возможных направлениях вдоль оси микропровода, что выражается в виде прямоугольной формы петли гистерезиса) перемагничивание происходит быстрым распространением доменной границы типа head–to–head (или tail–to–tail) [1]. Доменной границей такого типа и ее скоростью можно эффективно управлять: доменную границу можно инжектировать, захватить, удерживать, ускорить или замедлить [2, 3].

В данной работе мы исследовали влияние отжига с приложенными растягивающими напряжениями на магнитные свойства аморфных ферромагнитных микропроводов составов  $Co_{68.6}B_{14.8}Si_{10}Mn_{6.6}$ ,  $Co_{68.7}Fe_4Ni_1B_{13}Si_{11}Mo_{2.3}$ ,  $Co_{67.05}Fe_{3.85}Ni_{1.44}B_{11.53}Si_{14.47}Mo_{1.66}$  и в стеклянной оболочке. В исходном состоянии все изучаемые образцы имели *S*-образную форму петлю гистерезиса. Образцы микропроводов были отожжены при температурах 300, 350 и 400°C в течение различного времени. Максимальное время отжига составило 90 минут. Максимально приложенное растягивающее напряжение — 300 МПа. Магнитные свойства исследовались до и после отжига индукционным методом.

Мы наблюдали изменение магнитных свойств (коэрцитивной силы, поля насыщения и остаточной намагниченности) в зависимости от всех параметров отжига (времени, температуры и величины приложенных напряжений). Нами было обнаружено, что некоторые условия отжига ведут к возникновению бистабильности микропроводов, обладающих в исходном состоянии петлей гистерезиса *S*-образной формы, что позволяет реализовать и исследовать в них высокоскоростное движение доменной границы. При исследовании скорости движения доменной границы методом Сикстуса– Тонкса нами было обнаружено, что микропровода с приобретенной бистабильностью могут быть более подходящими для приложений, чем микроповода исходно бистабильные.

1. Zhukov A. et al., Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, American Scientific Publishers, V.X (2004).

2. Vazquez M. et al., Phys. Rev. Lett. 108, 037201 (2012).

3. Zhukov A., Rodionova V. et al., J. Appl. Phys. 114, 043910 (2013).

### Температурно–зависимые магнитные и структурные свойства микропроводов из сплавов Гейслера Ni–Mn–Ga в стеклянной оболочке

Шевырталов С.  $^{1\ast}$ , Чичай К.А. $^{1}$ , Жукова В. $^{2}$ , Жуков А. $^{2}$ , Ховайло В.В. $^{3}$ , Родионова В.В. $^{1}$ 

<sup>1</sup>Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия <sup>2</sup>Университет Страны Басков, Сан-Себастьян, Испания <sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия \*e-mail: shevyrtalov@gmail.com

В последние годы сплавы Гейслера на основе Ni – Mn – X привлекли к себе огромное внимание благодаря их большому количеству функциональных свойств, таких как эффект памяти формы и магнитокалорический эффект [1]. Микропровода в стеклянной оболочке, изготовленные из сплава Ni – Mn – Ga, являются перспективным кандидатом для создания нового поколения устройств на их основе, таких как устройства магнитного охлаждения и датчиков магнитного поля [2]. Мы исследовали магнитные и структурные свойства микропроводов из сплавов Ni – Mn – Ga, изготовленных методом Улитовского-Тейлора. Были исследованы микропровода с общими диаметрами 54.6 и 24.7 микрон и диаметрами металлической жилы 26.7 и 8.3 микрон соответственно. Методами энергодисперсионного анализа (Oxford Instr. X–Act) и рентгеновской диффрактометрии (Bruker D8 Discover) были определены химический состав и кристаллическая структура металлической жилы исходных и отожженных микропроводов. Зависимость магнитного момента от температуры 77-350 К и петли гистерезиса образцов при различных температурах были получены на вибрационном магнитометре (Lakeshore 7400 System). Было установлено, что температурный отжиг 833 К влияет на магнитные свойства, что объясняется увеличением степени структурного упорядочения в неотожженных микропроводах. Так же было установлено, что снятие напряжений, создаваемых стеклянной оболочкой, влияет на величину намагниченности микропроводов, что выражается в уменьшении величины с 109 ед. СГСМ/см<sup>3</sup> до 66 ед. СГСМ/см<sup>3</sup>. Величина температуры Кюри после снятия оболочки смещается в область более низких температур — с 325 К для проводов в стеклянной оболочке до 310 К для проводов без стеклянной оболочки.

1. Graf T., Felser C., Parkin S.S.P., Prog. Solid State Chem 39, 1 (2011).

2. Zhukov A., Journal of Alloys and Compounds 575, 73 (2013).

# Магнитные, магнитотранспортные и структурные свойства тонких пленок $Co_2(Fe,Ti)Ga$

Шевырталов С.<sup>1\*</sup>, Родионова В.В.<sup>1</sup>, Чичай К.А.<sup>1</sup>, Окубо А.<sup>2</sup>, Каинума Р.<sup>2</sup>, Уметсу Р.И.<sup>2</sup>, Охтсука М.<sup>2</sup>, Божко А.<sup>3</sup>, Голуб В.<sup>4</sup>, Горшенков М.<sup>5</sup>, Лянге М.<sup>5</sup>, Ховайло В.В.<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия <sup>2</sup>Университет Тохоку, Сендай, Япония <sup>3</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова, Москва, Россия <sup>4</sup>Институт магнетизма НАНУ, Киев, Украина <sup>5</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия \*e-mail: shevyrtalov@qmail.com

Мы исследовали магнитные, магнитотранспортные и структурные свойства тонких пленок  $Co_2(Fe, Ti)Ga$  с различным химическим составом, приготовленные методом магнетронного распыления в атмосфере аргона. Химический состав контролировался изменением мощности распыления мишеней. Значения концентраций были следующими:  $Co_{57.7}Fe_{1.8}Ti_{16.9}Ga_{23.6}$  (образец s1),  $Co_{56.4}Fe_8Ti_{13.3}Ga_{22.3}$  (образец s2), и  $Co_{53.2}Fe_{14.2}Ti_{19.8}Ga_{22.8}$  (образец s3). Исследования были проведены как для приготовленных образцов, так и для отожженных. Методом энергодисперсионного анализа был исследован химический состав тонких пленок. Структура приготовленных образцов была исследована на дифрактометре Ригаку с  $CuK_{\alpha}$  источником. Измерение магнитных свойств проводилось на вибрационном магнитометре (Lakeshore 7400) в температурном интервале 100–450 К. Петли гистерезиса в плоскости пленки снимались в двух положениях образца (0, 90 градусов) при различных температурах. Магнитосопротивление тонких пленок  $Co_2(Fe, Ti)Ga$  измерялось в магнитном поле до 10 кЭ в температурном интервале 100–450 К.

Рентгеновский анализ показал наличие структуры сплавов Гейслера  $L2_1$ , а также было показано наличие структурного упорядочения B2. Было найдено, что величина магнитосопротивления увеличивается с увеличением температуры. Измеренные в плоскости пленки при комнатной температуре петли гистерезиса демонстрируют анизотропное поведение на некоторых образцах, а также петли с так называемыми «ступеньками», что можно отнести к наличию двух кристаллических фаз. При низких температурах (100 K) анизотропное поведение у образцов s1 и s2 становится более выраженным, и коэрцитивная сила становится больше. После отжига при температуре 725 K в течение одного часа значение коэрцитивной силы при комнатной температуре осталось на том же уровне ( $\approx 25$  Э), однако при температуре 100 K увеличилось с 150 до 200 Э. Значение намагниченности после отжига увеличилось со значения 212 ед. СГСМ/см<sup>3</sup> до значения 475 ед. СГСМ/см<sup>3</sup> для образца s2 при комнатной температуре и с 415 ед. СГСМ/см<sup>3</sup> до 477 ед. СГСМ/см<sup>3</sup> для образца s3, что объясняется частичным переходом из кристаллической фазы B2 в фазу $L2_1$ . Были определены значения температуры Кюри для отожженных образцов, которые составили 350 K и 400 K для образцов s2 и s3 соответственно. Полученные результаты соответствует результатам, полученным для объемных материалов [1].

1. Okubo A., Umetsu R. Y., Nagasako M., Fujita A., Kainuma R., Ishida K., Scripta Mater. 59, 830 (2008).

# Фазовые переходы и критические явления

# Структура и диэлектрические свойства твердых растворов системы $Na_{1-x}Li_xNbO_3$ (0 $\leq x \leq 0.14$ , $\Delta x = 0.01$ ) в области криогенных температур

Болдырев Н.А.\*, Павленко А.В., Кубрин С.П.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия \*e-mail: huckwrench@gmail.com

Твердые растворы (ТР) на основе ниобата натрия (НН) интересны как с практической (моделирование и создание электроактивных материалов с уникальными свойствами), так и с теоретической (возможность разработки теории последовательных фазовых переходов (ФП)) точек зрения. В связи с этим представляется актуальным исследование его диэлектрических спектров в широкой области низкотемпературного ФП, наличие которой подтверждалось в [1]. Ранее подобные исследования (для горячепрессованной высокоплотной керамики) уже проводились в [2], однако в данном случае объектами исследования явились образцы ТР на основе ниобата натрия, полученные по обычной керамической технологии.

Объектами исследования явились ТР бинарной системы Na<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>NbO<sub>3</sub> (0  $\leq x \leq$  0.14,  $\Delta x =$  0.01). Синтез образцов осуществляли методом твердофазных реакций из Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, NaHCO<sub>3</sub> и LiNbO<sub>3</sub> высокой степени чистоты (ч, чда) обжигом в две стадии с промежуточным помолом при температурах  $T_1 =$  1123 К (время выдержки  $\tau_1 = 6$  ч) и  $T_2 =$  1143 К (время выдержки  $\tau_2 = 6$  ч). Спекание керамических заготовок осуществляли при  $T_S = (1463 - 1468)$  К в зависимости от состава в течение  $\tau_S = 2$  ч.

Исследование диэлектрических спектров в области температур (50 ÷ 300) К на частоте 1 МГц показали, что в интервале (170 ÷ 310) К наблюдается аномальное поведение действительной части комплексной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon'/\varepsilon_0$ , проявляющееся в наличии перегибов и гистерезисных явлений. Это может свидетельствовать о наличии в данной области низкотемпературного ФП. На рис. 1 черными точками показана зависимость температуры этого ФП от концентрации LiNbO<sub>3</sub> (*x*), которая, скорее всего, является частью полученной ранее [3] и приведенной на том же рисунке фазовой диаграммы исследуемой системы.



Рис. 1. Фазовая диаграмма исследуемой системы и график зависимости T(x), где T — температура фазового перехода. Сокращения: К — кубическая фаза, ПСК — псевдокубическая фаза, Р — ромбическая фаза, Рэ — ромбоэдрическая фаза, Т — тетрагональная фаза, ПЭ — параэлектрик, СЭ — сегнетоэлектрик, АСЭ — антисегнетоэлектрик.

Работа выполнена при финансовой поддержке

МОН РФ (базовая и проектная части гос. задания темы № 213.01–11/2014–21, 213.01-2014/012-ВГ, и 3.1246.2014/К) и ФЦП (ГК № 14.575.21.0007).

- 1. Raevskaya S.I., Raevski I.P. et al., J. Phys: Cond. Matt. 20(5), 232202 (2008).
- 2. Андрюшин К.П., Павелко А.А., Резниченко Л.А., Садыков Х.А., A book of abstracts and list of participants of XLVI school of ФГБУ «ПИЯФ» по физике конденсированного состояния (2012).
- 3. Шилкина Л.А., Резниченко Л.А. и др., ЖТФ 47(10) 2173 (1977).

#### Динамическая неоднородность переохлажденной жидкости с точки зрения калибровочной теории стеклования

Васин М.Г.

#### Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, Черноголовка, Россия e-mail: dr vasin@mail.ru

Проблема теоретического описания перехода жидкость–стекло до сих пор озадачивает теоретиков. С одной стороны, этот переход обладает отличительными чертами фазового перехода, такими как критическое замедление системы, пик температурной зависимости восприимчивости и резкое изменение теплоемкости вблизи перехода. С другой стороны, неравновесная динамика этого процесса в значительной степени определяет физические свойства стеклующейся системы, например приводит к зависимости температуры перехода от скорости охлаждения. Отсюда можно предположить, что теория, претендующая на описание перехода жидкость–стекло, должна сочетать в себе как методы описания динамики неравновесных систем, так и элементы квазиравновесной теории фазовых переходов. Эта концепция была реализована в предложенной недавно калибровочной теории стекольного перехода [1, 2], которая базируется на калибровочных подходах для описания стекла, предложенных в конце прошлого века [3–9].

Динамическая неоднородность в переохлажденных жидкостях была обнаружена не так давно при компьютерном моделировании стеклующихся жидкостей и стала одной из самых популярных тем для обсуждения среди специалистов в этой области [10]. Такой интерес объясняется тем, что динамическая неоднородность считается проявлением фундаментальных механизмов стеклования. Поэтому любая достаточно адекватная теория стеклования должна объяснять это явление. Целью данной статьи является обсуждение явления динамической неоднородности в переохлажденных аморфизующихся жидкостях с точки зрения калибровочной теории стеклования.

В рамках теории рассматривается физическая интерпретация динамического скейлинга, показано, что развитие динамической неоднородности объясняется ростом областей, в которых движение молекул коррелированы за счет упругого взаимодействия, описываемого в данной теории калибровочным полем. Получены аналитические выражения для зависимости количества динамически коррелированных атомов от времени релаксации системы и временной зависимости динамической восприимчивости вблизи стекольного перехода.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 14–12–01185).

- 1. Vasin M.G., J. Stat. Mech., P05009 (2011).
- 2. Васин М.Г., Теоретическая и математическая физика 174(3), 467 (2013).
- 3. Toulouse G, Commun. Phys. 2, 115 (1977).
- 4. Dzyaloshinskii I. E., Volovik G. E., J. Physique 39, 693 (1978).
- 5. Hertz J.A., Phys.Rev.B 18, 4875 (1978).
- 6. Rivier N., Duffy D.M., J. Physique 43, 293 (1982).
- 7. Nelson D.R., Phys.Rev.B 28, 5515 (1983).
- 8. Rivier N., Revista Brasileira de Fisica 15(4), 311 (1985).
- 9. Nussinov Z, Phys.Rev.B 69, 014208-1 (2004).
- 10. Berthier L., Biroli G., Rev. Mod. Phys. 83(2) 587 (2011).

#### Модель для описания эволюции карбонитридных выделений нескольких составов в сталях с учётом возможности образования новых частиц

Горбачёв И.И.\*, Пасынков А.Ю.

#### Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: gorbachev@imp.uran.ru

Недавно нами был предложен новый метод [1] и создана программа [2] для моделирования эволюции ансамбля комплексных карбонитридных выделений в матрице при изотермическом отжиге. Данный метод учитывает многокомпонентность системы, диффузионное взаимодействие элементов в твёрдом растворе, полидисперсность и конечную объёмную долю выделений, а его главной особенностью является возможность моделирования эволюции частиц нескольких различных составов. В то же время, хотя разработанная в [1] модель позволяет прогнозировать поведение выделений на стадиях роста, растворения и коагуляции, в ней не учитывается возможность зарождения новых частиц. А именно выделение новых частиц второй фазы на определённых этапах термообработки может оказывать решающее значение на формирование эксплуатационных свойств некоторых классов сталей, поэтому предложенная в [1] модель была модернизирована, с тем чтобы учесть в ней зарождение новых частиц.

В настоящей модели зарождение новых частиц учитывалось подобно тому, как это было сделано нами в работе [3]. Для частиц всех составов рассчитывалась скорость зарождения:

$$J^{f} = \rho D_{\text{eff}}^{f} X^{f} / a^{3} \exp\left(-\frac{\Delta G_{\text{crit}}^{f}}{RT}\right), \qquad (1)$$

где  $\rho$  — это плотность дислокаций, *a* — период решётки матрицы, *R* — универсальная газовая постоянная, *T* — температура (в К).  $\Delta G_{\text{crit}}$  — изменение энергии системы при образовании одного моля зародышей новой фазы критического радиуса.  $D_{\text{eff}}^f$  и  $X^f$  — эффективный коэффициент диффузии и концентрация элементов, контролирующих процесс зарождения, в матрице для частиц состава *f* рассчитывались по следующим формулам:

$$D_{\text{eff}}^{f} = \sum_{i \in Me} Y_{i}^{f} \tilde{D}_{ii} \bigg/ \sum_{i \in Me} Y_{i}^{f}, \quad X^{f} = \sum_{i \in Me} Y_{i}^{f} X_{i}^{m},$$
(2)

где  $Y_i^f$  — мольные доли элементов в металлической подрешетке (что обозначает  $i \in Me$ ) выделений состава f,  $\tilde{D}_{ii}$  — парциальные коэффициенты взаимной диффузии в матрице, а  $X_i^m$  — концентрация i-го компонента в матрице.

Полученные по формуле (1) скорости зарождения нормировались:

$$J_{\text{norm}}^{f} = \left(J^{f}\right)^{2} / \sum_{f} J^{f};$$
(3)

после чего вычислялось количество зародышевых центров, образующихся в единице объема за временной шаг, и соответствующее этому увеличение объемной доли фазы выделений *f*.

Работа выполнена при частичной поддержке УрО РАН (проект № 14–2–ИП–43).

- 1. Горбачев И.И., Попов В.В., Пасынков А.Ю., ФММ 114, 807 (2013).
- 2. Св-во о гос. регистрации программы для ЭВМ 2014616057 / EvoPCE. 10.06.2014.
- 3. Popov V.V., Gorbachev I.I., Alyabieva J.A. Phil. Mag, 85, 2449 (2005).

#### ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ УЛЬТРАТОНКИХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОК

<u>Елин А.С.</u><sup>1\*</sup>, Прудников П.В.<sup>2</sup>

#### Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия \*e-mail: alexey1691@mail.ru

В последнее время ультратонкие магнитные пленки стали объектов интенсивных исследований. Это вызвано тем, что в ультратонких пленках могут наблюдаться новые физические явления, которые не возникают в объемных образцах, например возникновение промежуточной фазы в метамагнитных пленках [1]. Область применения магнитных тонкопленочных структур простирается от технологий записи высокой плотности [2] до устройств спинтроники [3].

Гамильтониан моделируемой ферромагнитной пленки имеет вид

$$H = -J_{xy} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_z \sum_{(i,j)} S_i S_j,$$
 (1)

где  $S_i = \pm 1$  — спиновые переменные;  $J_{xy} = J_z = 1$  — константы внутрислоевого и межслоевого обменного взаимодействия между ближайшими спинами, которое носит ферромагнитный характер.  $\langle i, j \rangle$  означает суммирование по ближайшим соседям в слое, а (i, j) — суммирование по ближайшим спинам в соседних слоях.

Было проведено компьютерное моделирование системы с размерами  $L \times L \times l$  (где L — размер в плоскости, а l — число слоев), используя алгоритм Метрополиса, вплоть до 10000 шагов Монте-Карло на спин (MCS/s). Для нахождения значений критических показателей z и  $\theta'$  использовался метод коротковременной динамики, позволяющий получать информацию об универсальном критическом поведении на относительно малых промежутках времени до 1000 MCS/s. С этой целью исследовались временные зависимости намагниченности при  $T = T_c$  как при эволюции из высокотемпературного начального состояния со значением начальной намагниченности  $m_0 \ll 1$ , так и низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1$ . В первом случае намагниченность ведет себя как  $m_0 \sim t^{\theta'}$ , а во втором — как  $m_0 \sim t^{-\beta/zv}$ . Исходя из этого неравновесного поведения определялись динамические критические индексы, значения которых представлены в табл. 1.

<i>l</i> , ML	Z	θ′
2	2.1082(27)	0.205(1)
4	2.1936(20)	0.194(3)
6	2.2319(47)	0.263(3)
8	2.0285(87)	0.227(3)
10	2.1449(21)	0.207(1)

Таблица 1. Значения критических показателей z и θ'.

Из представленных данных можно сделать вывод, что ультратонкие магнитные пленки с  $l \leq 10$  принадлежат динамическому классу универсальности двумерной модели Изинга.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда проект №№ 14–12–00562. Для проведения расчетов были использованы ресурсы суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

1. Chou Y.-L., Pleimling M., Phys.Rev. B 84, 134422 (2011).

2. Chappert C., Fert A., Nguyen van Dau F., Nature Mater. 6, 813 (2007).

3. Mangin S., Ravelsona D., Katine J.A. et al., Nat. Mater. 5, 210 (2006).

### Термодинамическая модель двойных сплавов с изоморфными решетками компонентов и промежуточной сигма–фазой

Ефимова Е.Д.<sup>1</sup>\*, Русаков Г.М.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: efimova@imp.uran.ru

В работе предложена простая термодинамическая модель двойных сплавов, которые характеризуются непрерывной растворимостью компонентов при высоких температурах, но расслаиваются или образуют промежуточную фазу ( $\sigma$ -фазу) при охлаждении [1]. В основу модели положен феноменологический неравновесный термодинамический потенциал (НТП) Ландау, зависящий от скалярного параметра порядка, который описывает образование  $\sigma$ -фазы и приближение регулярного раствора для термодинамического описания твердого раствора. Простой способ учесть при моделировании разный характер взаимодействия атомов в твердом растворе и  $\sigma$ -фазе заключается во введении параметра порядка  $\varphi$ , который «следит» за фазовым состоянием взаимодействующих атомов, т.е. принимает разные значения для конкурирующих фаз. Таким образом, необходимо записать феноменологический НТП, который является функцией  $\varphi$ . Учтем, что без образования  $\sigma$ -фазы сплав ведет себя как расслаивающийся при охлаждении твердый раствор. Простейшей моделью такого поведения является приближение регулярного раствора [2]. В итоге удельный НТП сплава  $G(c, T, \varphi)$  представлен в виде суммы потенциала Ландау как функции скалярного параметра порядка  $\varphi$  и свободной энергией (энтальпией) смешения:

$$G(c, T, \varphi) = G_{\rm L}(c, T, \varphi) + G_0(c, T).$$
(1)

Уравнение состояния  $\partial G_0/\partial \varphi = 0$  имеет два устойчивых решения  $\varphi = 0$  и  $\varphi = 1$ . Поскольку фазой с  $\varphi = 0$  естественно является твердый раствор, а  $\sigma$ -фазе отвечает  $\varphi = 1$ , эти значения параметра порядка  $\varphi$  могут быть интерпретированы как маркеры этих двух возможных состояний сплава. Равновесные удельные свободные энергии для твердого раствора и  $\sigma$ -фазы имеют вид:

$$G_{\rm sol}(c,T) = G_0(c,T),\tag{2}$$

$$G_{\sigma}(c,T) = G_0(c,T) + \tilde{g}(2p(c,T)-1).$$
(3)

С помощью стандартной процедуры построения фазовых диаграмм (ФД) и варьированием двух параметров относительной стабильности фаз, имеющих прозрачный физический смысл (первый характеризует лабильность твердого раствора к распаду, второй — стабильность  $\sigma$ -фазы по отношению к твердому раствору того же состава), удается получить пять вариантов фазовых диаграмм двойных сплавов: ФД с промежуточной  $\sigma$ -фазой и однородным твердым раствором выше максимальной температуры ее существования; ФД, на которой существование  $\sigma$ -фазы ограничено сверху тройным перитектоидным равновесием и куполом расслаивания твердого раствора; ФД, на которой область равновесного существования  $\sigma$ -фазы ограничена по температуре снизу эвтектоидным равновесием и эвтектоидным равновесиями областью существования  $\sigma$ -фазы; ФД с метастабильной  $\sigma$ -фазой.

Работа выполнена при поддержке Проекта № 12-У-2-1022.

- 1. Rusakov G., Son L., Efimova E., Dubinin N., Ordering in binary transition metal alloy, Thermochimica Acta **532**, 103 (2012).
- 2. Кристиан Дж., Теория превращений в металлах и сплавах, М.: Мир (1978).

# ТЭДС графита и смесей графита с оксидом циркония при давлениях от 6 до 44 ГПа

Жарков А.В.\*, Тихомирова Г.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: gvizdon@gmail.com

Для измерений использовалась камера высокого давления с наковальнями типа «закругленный конус–плоскость», изготовленными из искусственных поликристаллических алмазов «карбонадо» [1]. Данные, полученные в ходе исследований, в дальнейшем помогут при моделировании фазовых переходов углерода и смесей с его содержанием.

Были получены зависимости ТЭДС графита, смесей графита с оксидом циркония в объемных пропорциях 40% графита 60% оксида циркония и 50% графита 50% оксида циркония в диапазоне давлений от 6.7 ГПа до 44 ГПа. Зависимости ТЭДС смесей представлены на рис. 1. Исходя из полученных данных, качественное поведение ТЭДС смесей графита с оксидом циркония при обработке высоким давлением схоже с поведением зависимости ТЭДС графита, представленными на рис. 2. Приложение давления вызывает увеличение абсолютной величины ТЭДС.

При изменении давления время релаксации ТЭДС для графита и смесей укладывается в диапазоне одной минуты, постепенно уменьшаясь при увеличении давления. Установлено, что в поведении ТЭДС смесей графита с оксидом циркония в зависимости от давления существует особенность в диапазоне давлений от ~22 ГПа до ~34 ГПа. Эта особенность, вероятно, связана с фазовыми переходами в графите [2]. Так же наблюдается особенность поведения ТЭДС в области ~40 ГПа, которая,



Рис. 1. Барическая зависимость ТЭДС смеси графита с оксидом циркония в объемных пропорциях 50% графита и 50% оксида циркония (а, б, в), 40% графита и 60% оксида циркония (г).



Рис. 2. Барическая зависимость ТЭДС графита (а,б).

вероятно, обусловлена содержанием оксида циркония в смеси. В связи с высокой электропроводностью графита при низких давлениях преобладает вклад графита в зависимость ТЭДС. При давлениях выше 30–35 ГПа вклад оксида циркония становится сопоставим с вкладом графита, и проявляются особенности, связанные с содержанием в образцах оксида циркония.

- 1. Верещагин Л.Ф., Яковлев Е.Н. и др., Письма в ЖЭТФ **16**(4), 240 (1972).
- 2. Quan L., Yanming M., Oganov A.R., Phys. Rev. Lett. 102, 175506 (2009).

#### Вязкость и кристаллизация квазикристаллообразующих расплавов Al–Cu–Fe

Камаева Л.В.\*, Ладьянов В.И.

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия \*e-mail: lara\_kam@mail.ru

Система Al–Cu–Fe — одна из наиболее исследуемых квазикристалообразующих систем. Квазикристаллические сплавы этой системы обладают высокой твердостью и хорошей износостойкостью при малом коэффициенте трения и широко используются в промышленности в качестве покрытий. С другой стороны, эти сплавы являются привлекательными объектами в качестве модельных при изучении механизмов образования квазикристаллического состояния и условий его существования. В системе Al–Cu–Fe одной из первых была обнаружена стабильная икосаэдрическая фаза i — Al<sub>62</sub>Cu<sub>25.5</sub>Fe<sub>12.5</sub>. Икасаэдрическую квазикристаллическую фазу в системе Al–Cu–Fe получают отжигом аморфных сплавов и механосинтезом. При получении икосаэдрической фазы в сплавах Al–Cu–Fe методом кристаллизации из расплава с последующим отжигом при 700°C максимальное количество i-фазы обычно наблюдается при незначительных перегревах над линией ликвидус. Увеличение величины перегрева приводит к тому, что квазикристаллическая фаза не образуется. Однако в литературе встречаются только единичные работы, в которых делаются попытки связать квазикристаллическое состояние и особенности его образования из расплава со структурой жидкой фазы.

В данной работе проведено исследование температурных и концентрационных зависимостей вязкости (v) расплавов Al<sub>52+x</sub>Cu<sub>35.5-x</sub>Fe<sub>12.5</sub>, где x = 2.5–20 с шагом по концентрации 2.5 ат.%. А также изучены процессы кристаллизации этих сплавов в условиях небольших скоростей охлаждения (до 100 °C/мин) в контейнере из Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. В зависимости от температуры величина v исследованных расплавов изменяется незначительно (в пределах от 8 до  $5 \cdot 10^{-7}$  м<sup>2</sup>/с). Полученные температурные зависимости вязкости монотонны, совпадают в режиме нагрева и охлаждения и хорошо описываются экспоненциальной зависимостью. Концентрационные зависимости вязкости, построенные по политермам v, также монотонны. Кинематическая вязкость расплавов Al<sub>52+x</sub>Cu<sub>35.5-x</sub>Fe<sub>12.5</sub> слабо зависит от атомного соотношения алюминия и меди в выбранном интервале концентраций. Это свидетельствует об отсутствии каких–либо значительных изменений в ближнем порядке в расплавах Al–Cu–Fe в области стехиаометрии *i*-фазы при варьировании концентрации меди от 15 до 35 ат.%.

Исследование процессов кристаллизации расплавов показывает, что условия зарождения и роста первичных фаз одинаковы, кристаллизация сплавов независимо от состава начинается при переохлаждениях 30–50°С и согласно равновесной диаграмме состояния. Кристаллизация сплавов с содержанием меди до 25.5 ат.% начинается с образования интерметаллида Al<sub>3</sub>Fe при концентрации от 25.5 до 35 ат.%, на первой стадии выделяются кристаллы твердого раствора на основе Al<sub>3</sub>Cu.

Таким образом, полученные результаты показывают, что в расплавах  $Al_{52+x}Cu_{35.5-x}Fe_{12.5}$ , где x = 2.5-20, не наблюдается резких изменений в атомном ближнем порядке, который оказывает слабое влияние на прцессы кристаллизации в контейнере при небольших скоростях охлаждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ № 13-03-96115 (р\_урал\_а).

### Размерные эффекты в критических свойствах многослойных ферромагнетиков

<u>Меньшикова М.А.</u>\*, Прудников П.В.

#### Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия \*e-mail: mmed@mail.ru

В последнее время уделяется большое внимание изучению свойств тонких магнитных пленок [1]. Критические свойства тонких пленок чувствительны к эффектам анизотропии, создаваемой кристаллическим полем подложки. Учет данных эффектов в многослойных системах может приводить к смене критического поведения. В данной работе проводилось численное исследование тонких ферромагнитных пленок при применении к описанию их физических свойств анизотропной модели Гейзенберга с гамильтонианом:

$$H = -J \sum_{i,j} [(1 - \Delta(N))(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z],$$
(1)

где  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  — это трехмерный единичный вектор в узле *i*, J > 0 характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер,  $\Delta$  — параметр анизотропии. Значение  $\Delta = 0$  соответствует изотропной модели Гейзенберга, а  $\Delta = 1$  — модели Изинга. Моделирование проводилось методом Монте–Карло для пленок с размерами  $N_s = L \times L \times N$  с наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки. В данной работе рассматривались системы с линейными размерами L = 32,48,64 и числом слоев, изменяющемся в диапазоне от N = 1 до N = 32. В температурном интервале T = 0.01–5.01 с шагом  $T_{\text{step}} = 0.02$  были исследованы температурные зависимости намагниченности *m* и ее составляющие: намагниченность, ориентированная по нормали к плоскости пленки  $m_z = \langle (1/N_s) \sum S_i^z \rangle$ , и намагниченность в плоскости пленки  $m_{xy} = \langle (m_x^2 + m_y^2)^{1/2} \rangle$ .



Рис. 1. Значения критических индексов v,  $\beta$ ,  $\gamma$  и эффективной размерности  $d_{\text{eff}}$ .

В исследованиях, посвященным тонким пленкам [1], экспериментально наблюдается переход от двумерных к трехмерным критическим свойствам многослойных магнетиков с ростом толщины пленки. В данной работе были рассчитаны  $\gamma$ ,  $\beta$  и  $\nu$  — эффективные критические индексы восприимчивости  $\chi$ , намагниченности *m* и корреляционной длины  $\xi$  (рис. 1) соответственно. Так, полученное усредненное значение индекса  $\gamma = 1.73(5)$  [2] для  $N \leq 5$  хорошо согласуется с экспериментальным значением  $\gamma = 1.75(2)$ , измеренным для двухслойной пленки Fe/W(110) в работе [3]. Впервые выявлен переход от двумерных к трехмерным свойствам в поведении многослойных магнетиков с ростом толщины пленки.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда проект № 14–12–00562. Для проведения рас-

четов были использованы ресурсы суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

- 1. Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G., Rep. Prog. Phys. 71, 056501 (2008).
- 2. Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А., Письма в ЖЭТФ 100, 501 (2014).
- 3. Dunlavy M. J., Venus D., Phys. Rev. B 69, 09441 (2004).

### Эволюция микроструктуры и механических свойств сплава Cu–47ат.%Pd в процессе атомного упорядочения после ИПД прокаткой

<u>Новикова О.С.</u>\*, Антонова О.В., Волков А.Ю.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: vodohlebchik@mail.ru

В последнее время открылись перспективы использования упорядоченных сплавов Cu–Pd в качестве мембранных материалов для извлечения водорода из газовых смесей. В соответствии с литературными данными, оптимальным набором свойств для сепарации водорода обладают мембраны из сплава Cu–47 ат.% Pd [1]. Мембраны представляют собой фольги толщиной несколько микрометров. В настоящее время для получения таких мембран чаще всего используют метод распыления мишени из сплава на подложку. Ранее нами было установлено, что сплавы медь–палладий могут быть продеформированы кручением под высоким давлением на очень большие степени (до  $\varepsilon \approx 7.5$ ) без каких– либо признаков разрушения [2]. На основе полученных результатов было предположено, что процесс получения мембран из сплава Cu–47 ат.% Pd можно существенно упростить, используя только интенсивную пластическую деформацию (ИПД) прокаткой исходной заготовки до тонкой ленты.

Целью настоящей работы является проведение электронно–микроскопического исследования микроструктуры, а также изучение физико–механических свойств тонких лент из сплава Си–47 ат.% Рd в сильно деформированном состоянии и после термообработок различной продолжительности.

Сплав Cu–47 ат.% Pd деформировался прокаткой при комнатной температуре от слитка диаметром 8 мм до лент толщиной 100 мкм и 4.5 мкм без промежуточных отжигов (истинная степень ИПД  $\varepsilon \approx 4.4$  и  $\varepsilon \approx 7.5$  соответственно).

Исследование микроструктуры осуществляли с помощью просвечивающей электронной микроскопии на приборе JEM 200–СХ при ускоряющем напряжении 160 кВ. Фольги для электронной микроскопии получали методом электролитической полировки в концентрированной азотной кислоте HNO<sub>3</sub>.

Установлено, что высокая пластичность сплава при прокатке объясняется процессами динамического возврата, которые протекают в материале в ходе ИПД. Показано, что в микроструктуре тонких лент сплава Cu–47 ат.% Pd после ИПД наблюдается субзеренная структура с отдельными кристаллитами внутри ламелей (ламели обычно наблюдают на стадии развитой пластической деформации [2, 3]). Построены кинетические кривые, проведена оценка энергии активации процессов атомного упорядочения в сплаве после предварительной ИПД. Показано, что отжиг деформированного на  $\varepsilon \approx 7.5$  сплава при температуре 400°С в течение 1 часа приводит к образованию упорядоченной мелкозернистой структуры во всем объеме ленты. Установлено, что при отжиге сильно деформированного сплава при температуре 400°С реализуется комплексная реакция, когда процессы атомного упорядочения и рекристаллизации протекают одновременно и взаимно ускоряют друг друга.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Деформация» № 01201463327 (проекты №№ 14–2–НП–118 и 12–У–2–1004).

1. Howard B.H., Killmeyer R.P., Rothenberger K.S., Cugini A.V., Morreale B.D., Enick R.M., Bustamante F., J. Membr. Sci. **241**, 207 (2004).

2. Antonova O.V., Volkov A.Yu., Intermetallics 21, 1 (2012).

3. Mishin O.V., Godfrey A., Jensen D.J., Hansen N., Acta Mater. 61, 5354 (2013).

#### Прогнозирование размеров аустенитного зерна на основе моделирования эволюции карбонитридных выделений в сталях

Пасынков А.Ю.\*, Горбачёв И.И.

#### Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: apasynkov@list.ru

При производстве сталей, как правило, стремятся уменьшить размер аустенитного зерна, так как это позволяет улучшить показатели прочности и вязкости сплава. Одним из наиболее популярных методов для этого является легирование сталей V, Nb и Ti, которые, выделяясь в виде карбонитридных фаз на границах зёрен, сдерживают их рост при рекристаллизации во время и после термомеханической обработки. В настоящей работе делается попытка оценить возможность прогнозирования размеров аустенитного зерна после термомеханической обработки с помощью нашего нового метода моделирования эволюции ансамбля карбонитридных выделений, который учитывает возможность образования новых частиц.

Сравнение результатов расчётов проводилось с экспериментальными данными, приведёнными в работах [1,2]. На основе приведённой в [1,2] информации были заданы начальные условия по составу, количеству и среднему размеру карбонитридных выделений, а затем с помощью кинетического моделирования воспроизводились условия изотермической выдержки, аналогичные условиям экспериментов в работах [1,2], — для состава 1 из [1] (Fe — 0.06% C — 0.034% Nb — 0.012% Ti — 0.005% N) — выдержки при 950, 1050, 1150 и 1250 °C в течение 20 минут и для состава 2 из [2] (Fe — 0.26% C — 0.02% Ti — 0.001% N — 0.2% V) — при температуре 1180°C в течение часа. После этого на основе модели Зинера был оценен максимальный средний размер аустенитного зерна (это размер, больше которого зёрна не могут вырасти при рекристаллизации, если единственным сдерживающим фактором роста являются выделения второй фазы):

$$D_{\gamma} = \frac{4}{3} \frac{R}{F},\tag{1}$$

где  $D_{\gamma}$  — размер зерна аустенита,  $\bar{R}$  — средний радиус частиц вторых фаз, F — объемная доля выделений.

Сравнение результатов расчётов максимального среднего размера зёрен ( $D_{calc}$ ) с приведёнными в [1,2] экспериментальными данными по среднему размеру аустенитного зерна ( $D_{exp}$ ) приведено в табл. 1. Видно, что результаты моделирования демонстрируют хорошее согласие с экспериментом, что позволяет рекомендовать использование нашего нового метода кинетического моделирования для проведения подобных расчётов.

Состав	Температура, °С	F	<i></i> , нм	$D_{ m calc}$ , мкм	$D_{ m exp}$ , мкм
состав 1	950	0.000509695	5.85	15.3	8.5
	1050	0.000243336	9.93	54.42	23
	1150	0.000227053	9.94	58.37	47
	1250	0.000200482	12.11	80.52	62
состав 2	1180	0.000200629	18.78	124.81	105.3

Таблица 1. Сравнение результатов расчётов с экспериментальными данными.

Работа выполнена при частичной поддержке УрО РАН (проект № 14–2–ИП–43).

1. Maalekian M., Acta Materialia 60, 1015 (2012).

2. Yang G., Journal of iron and steel research, international **20**, 64 (2013).

#### Возможность получения новых фаз в графите при холодном сжатии

Петросян Т.К.\*, Кузнецов Д.К., Тихомирова Г.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: alximik-ptk@rambler.ru

В последнее время исследование графита при холодном сжатии вызывает большой интерес [1–3]. Диапазон давлений до 20 ГПа подробно исследован, обнаружен обратимый переход в фазу, названную М–углерод [1].

Нами изучалась возможность получения новых фаз в графите марки ГМЗ ОСЧ в области давлений от 18 ГПа до 45 ГПа при комнатной температуре. Для обнаружения и диагностики фазовых переходов, инициированных высоким давлением, и изучения их динамики использовали исследование явлений переноса (электропроводность, магнитосопротивление).



Рис. 1. Изображение отпечатка обработанного давлением образца графита в фазовом контрасте с электронного микроскопа.

Измерения проводились в камере высокого давления (КВД) типа «закругленный конус-плоскость» с наковальнями, изготовленными из синтетических поликристаллических алмазов «карбонадо». Измерения проводились циклами с пошаговым увеличением и уменьшением давления от 18 ГПа до 45 ГПа. Время выдержки на одной точке составляло сутки. Обнаружены особенности на барической зависимости сопротивления в области 27-35 ГПа. В этом же интервале давлений обнаружены особенности на барических зависимостях магнитосопротивления и времен релаксации сопротивления. По-видимому, это связано с возникновением зародышей новой фазы.

После снятия барических зависимостей образец был помещён в рабочую станцию AURIGA CrossBeam, представ-

ляющую собой сканирующий электронный микроскоп с возможностью рентгеновского микроанализа. На рис. 1 показан снимок отпечатка образца, подвергнутого давлению в 45 ГПа. На нем ясно прослеживаются включения новой фазы, которая сохранилась после снятия нагрузки. Однако фаза, которая по сообщениям [1–3] должна быть изолятором, на графике барической зависимости электросопротивления проявляет себя слабо, так как шунтируется большим количеством графита, оставшегося после воздействия на образец давлением.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 13–02–96039–р\_урал\_а.

- 1. Li Q., Ma Y., Oganov A.R. et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 175506 (2009).
- 2. Amsler M., Flores-Livas J. et al., Phys. Rev. Lett. 108, 065501 (2012).
- 3. Wang Y., Panzik J.E., Kiefer B., Lee K.K.M., Scientific Reports 2, 520 (2012).

#### Схема теплового насоса, основанного на фазовом переходе ферромагнетик–антиферромагнетик в сплавах железо–родий, индуцированного давлением

Родионов В.В.\*, Родионова В.В., Аннаоразов М.П.

Балтийский федеральный университет имени И. Канта, Калининград, Россия \*e-mail: rodionov\_vlad@mail.ru



Рис. 1. Эффективность  $\phi_1$  цикла теплового насоса, основанного на переходе ферромагнетик–антиферромагнетик в сплаве FeRh, вызванным давлением.  $T_c(P')$  — критическая температурва F–AF перехода при давлении P',  $T_s$  — температура окружающей среды.

Цикл теплового насоса, основанного на индуцированном давлением или магнитым полем фазовом переходе антиферромагнетик-ферромагнетик в сплаве железо-родий последнее время активно обсуждается [1,2]. Поскольку этот переход может быть также вызван давлением [3], это может быть использовано для реализации цикла объединенного теплового насоса при изменении знака механических напряжений, действующих на сплав. Это может быть использовано, например, и для расширения температурного диапазона перехода. Настоящая работа посвящена оценке эффективности цикла теплового насоса, действующего на основе фазового перехода ферромагнетикантиферромагнетик в сплаве железо-родий.

Эффективность цикла теплового насоса выражается в коэффициенте полезного действия ф, который определяется как отношение величины тепла, отдающегося системой во время перехода, QHR, к величине работы по переносу энергии в систему для достижения этого эффекта.

На основе модели «S–T projection» S–T–P поверхности для сплава FeRh [4] 3 типа цикла теплового насоса было рассмотрено:

(1) с получением тепла сплавом от внешнего источника;

(2) частичное поступление тепла от внешнего;

(3) и цикл, основанный на адиабатически вызванном давлением переходе ферромагнетикантиферромагнетик.

Были проанализированы соответствующие коэффииенты  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ , и  $\phi_3$  этих циклов как функция температуры при варьируемых отличиях между начальной и конечной температурами (постоянная тепловая нагрузка  $\Delta T$ ) и как функция давления при варьируемых отличиях между начальной и конечной температурами [4].

Обнаружено, в частности (рис. 1), что в температурном диапазоне (320–370) К и диапазоне давлений  $(0.4 - 1.0) \cdot 10^9$  Па эффективность цикла теплового насоса принимала значение от 30 до 35. Эти величины сравнимы с величинами, найденными ранее в работе [1] с использованием растягивающих напряжений величиной  $\psi = 1 \cdot 10^9$  Па и в работе [2] с использованием магнитного поля величиной до  $H = 2 \cdot 10^6$  А/м.

1. Annaorazov M.P. et al., Int. J. Refrigeration 25, 1034 (2002).

2. Annaorazov M.P. et al., J. Magn. Magn. Mater. 251, 61 (2002).

3. Vinokurova L.I. et al., Phys. stat. sol. (b) 78, 353 (1976).

4. Annaorazov M.P., J. Alloys Compd. 354, 1 (2003).

#### Конкуренция атомных масштабов как механизм образования квазикристаллической фазы

Рыльцев Р.Е.<sup>1</sup>\*, Клумов Б.А.<sup>2</sup>, Щелкачев Н.М.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия <sup>3</sup>Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия \*e-mail: rrylcev@mail.ru

В последние годы было обнаружено, что многие сложные эффекты в реальных системах могут быть качественно объяснены наличием двух характерных масштабов в потенциале межатомного взаимодействия. Потенциалы, обладающими таким свойством, возникают при построении эффективных взаимодействий в металлических сплавах, жидкостях с направленными связями, коллоидных системах. Было показано, что конкуренция между указанными масштабами может приводить к полиморфизму, водоподобным аномалиям и стекольной динамике (см. [1] и приведённые там ссылки). Хорошо известно, что очень многие эффекты в плотных конденсированных системах обусловлены именно отталкивающей частью межатомного потенциала. Одним из характерных примеров является кристаллизация, которая прекрасно описывается даже в простейшей модели твёрдых сфер. Более того, многие системы (например коллоидные частицы, стабилизированные полимерами) имеют чисто отталкивающее эффективное взаимодействие. В этой связи является интересным исследование конкуренции между масштабами на процесс кристаллизации.

В данной работе мы показываем, что при определённом соотношении между характерными масштабами однокомпонентная система с отталкивающим потенциалом демонстрирует переход жидкость–квазикристалл. Это единственный пример такого перехода в трёхмерных однокомпонентных системах с чисто отталкивающим взаимодействием.

Мы исследовали модель «коллапсирующих сфер» — систему с потенциалом мягких сфер, к которому добавлена отталкивающая добавка большего радиуса [1]. Для проведения компьютерного моделирования мы использовали пакет DL\_POLY 4.05. Все расчеты осуществлялись на кластере «Уран» на базе суперкомпьютерного центра УрО РАН.

Система, состоящая из 64000 частиц, моделировалась при периодических граничных условиях в NVT и NPT ансамблях. Для каждой исследованной плотности система предварительно релаксировалась при высокой температуре, а затем последовательно охлаждалась в квазиравновесном режиме. В определённом интервале плотностей (давлений) в ходе такого охлаждения наблюдался спонтанный фазовый переход первого рода. Анализ структурных и динамических свойств показал, что низкотемпературная фаза представляет собой декагональный квазикристалл. Было показано, что механизм образования квазикристаллической фазы заключается в создании благоприятных условий для образования и роста крупномасштабных икосаэдрических кластеров, которые становятся энергетически выгодными в силу наличия определённых долей атомов, находящихся на меньших расстояниях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 12–03–00757, № 14–02–00359), Уральского отделения РАН (проект № РЦП–14–ПЗ) и программы президиума РАН (№ 12–П–3–1013). 1. Ryltsev R.E., Chtchelkatchev N.M., Ryzhov V.N., Phys. Rev. Lett. **110**, 025701 (2013).

### Реологические свойства системы гидроксипропилцеллюлоза–этиленгликоль в магнитном поле

<u>Солиман Т.С.</u>\*, Галяс А.Г., Вшивков С.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: tarek\_soliamn@mail.ru

Молекулы целлюлозы и ее производных имеют жесткую спиральную конформацию и способны упорядочиваться, образуя в концентрированных растворах жидкие кристаллы холестерического типа. Способность жидких кристаллов изменять структуру под действием магнитного и электрического поля может дать дополнительные возможности управления реологическими свойствами модифицированных производными целлюлозы [1].

Цель настоящей работы — изучение реологических свойств растворов гидроксипропилцеллюлозы в этиленгликоле в магнитном поле и в его отсутствие.

Исследовали гидроксипропилцеллюлозу (ГПЦ) марки PR производства фирмы «Aqualon–Hercules» с молекулярной массой  $M \sim 10^5$  и со степенью замещения 3.6. В качестве растворителя использовали этиленгликоль марки «ч», о чистоте которого судили по показателю преломления. Растворы готовили в течение 30–40 суток при 363 К. Для определения фазового состояния растворов при 298 К использовали поляризационную фотоэлектрическую установку. В зазор между скрещенными поляроидами (поляризатором и анализатором) помещали ампулу с раствором полимера. Увеличение интенсивности светопропускания при изменении температуры или концентрации растворов свидетельствовало об анизотропном фазовом переходе, т.е. об образовании жидкокристаллической фазы.

Измерения вязкости растворов проводили с помощью модифицированного реометра Rheotest RN 4.1. Для изучения влияния магнитного поля на реологические свойства растворов использовали магниты, создающие постоянное магнитное поле с напряженностью 3.7 и 3.6 кЭ с направлением силовых линий перпендикулярно и параллельно оси вращения ротора соответственно.

Обнаружено, что с увеличением скорости сдвига вязкость растворов уменьшается, т.е. растворы ГПЦ в этиленгликоле являются неньютоновскими жидкостями. Наложение магнитного поля увеличивает вязкость растворов. Это может быть связано с дополнительной организацией макромолекул, причиной которой является их способность к ориентации в магнитном поле [2,3].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 12–08–00381–а).

- 1. Vshivkov S.A., Effect of magnetic and mechanical fields on phase liquid crystalline transitions in solutions of cellulose derivatives, Thermodynamics. Physical chemistry of aqueous systems, In Tech. Croatia. P. 407 (2011).
- 2. Вшивков С.А., Галяс А.Г., Куценко Л.И., Тюкова И.С., Терзиян Т.В., Шепетун А.В., Высокомолек. соед. А **53**, 3 (2011).
- 3. Вшивков С.А., Галяс А.Г., Высокомолек. соед. А 53, 1892 (2011).

#### Микроскопическая динамика жидкого галлия

Тахавиев И.Д.\*, Хуснутдинов Р.М.

#### Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия \*e-mail: tahaviev@yahoo.com

Методом атомарной/молекулярной динамики на основе модели потенциала «погруженного» атома (ЕАМ–потенциала, эффективным образом учитывающего многочастичные взаимодействия) исследуется коллективная динамика атомов расплава галлия вблизи и выше температуры плавления. На основе анализа спектра динамического структурного фактора  $S(k,\omega)$  и спектральных плотностей временной корреляционной функции продольного  $\tilde{C}_L(k,\omega)$  и поперечного  $\tilde{C}_T(k,\omega)$  потока установлено, что динамика флуктуаций плотности характеризуется двумя дисперсионными акустико– подобными ветвями продольной и поперечной поляризации. Показано влияние многочастичных корреляций на высокочастотную динамику атомов галлия. Установлено, что увеличение валентности системы приводит к изменению закона дисперсии. Показано, что электронные особенности системы, помимо оптических свойств, предопределяют также и акустические свойства вещества.

Крупномасштабные молекулярно–динамические расчеты были выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук. Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФИ (грант № 14–02–00335–а).

# Кристаллическая структура и фазовый переход в EuBaCo<sub>2-x</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> (x = 0; 0.1)

<u>Телегин С.В.<sup>1, 2\*</sup>, Наумов С.В.<sup>1</sup>, Резницких О.Г.<sup>3</sup></u>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>3</sup>Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: svtelegin@imp.uran.ru

Слоистые двойные перовскиты  $LnBaCo_2O_{6-\delta}$ , где Ln — редкоземельный элемент, привлекают большой интерес благодаря открытию в этих соединениях таких явлений как гигантское магнитосопротивление, зарядовое упорядочение, переход металл–изолятор. Известно, что содержание кислорода в  $LnBaCo_2O_{6-\delta}$  оказывает существенное влияние на структурные, электрические и магнитные свойства [1]. Было установлено, что введение вакансий в кобальтовую подрешетку введет к изменению магнитных свойств и магнитной фазовой диаграммы GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.5</sub> [2].

Цель работы: исследование физико-химических свойств  $LnBaCo_{2-x}O_{6-\delta}$  (Ln = Eu).

Образцы EuBaCo<sub>2-*x*</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> (*x* = 0;0.1) были приготовлены по стандартной керамической технологии в интервале температур 900–1150°С. Фазовый состав образцов контролировали рентгеновскими методами. Калориметрические измерения проведены в температурном интервале 30–600°С (рис. 1), рентгеновские исследования — при *T* = 20 ÷ 500 °С (рис. 2).



Рис. 1. Фрагменты калориметрических кривых ЕиBaCo<sub>2-x</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub>.



Рис. 2. Фрагменты рентгеновских дифрактограмм  $EuBaCo_{2-x}O_{6-\delta}$  ( $Cu_{K_{\alpha}}$ ).

Фазовый переход из орторомбической фазы в тетрагональную в образце с дефицитом кобальта EuBaCo<sub>1.9</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> по сравнению со стехиометрическим образцом смещается на  $\sim 10^{\circ}$ C в низкотемпературную область: от 465 к 455°C (рис. 1 и 2). Согласно калориметрическим измерениям, тот же фазовый переход для EuBaCo<sub>1.9</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> претерпевает значительные изменения: одиночный тепловой эффект (для EuBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub>) расщепляется на два.

Дефицит кобальта в EuBaCo $_2O_{6-\delta}$  оказывает существенное влияние на высокотемпературный фазовый переход. Физико–химические свойства сложных оксидов зависят не только от содержания кислорода в них, но и от состояния катионной подрешетки.

Работа выполнена при частичной поддержке проектов РФФИ № 14–02–00432 и УрО РАН № 14–2– НП–247.

- 1. Аксенова Т.В., Гаврилова Л.Я., Цветков Д.С., Воронин В.И., Черепанов В.А., Журнал Физической Химии **85**, 493 (2011).
- 2. Arbuzova T.I., Telegin S.V., Naumov S.V., Patrakov E.L., Rezniskih O.G., Solid State Phenomena 215, 83 (2014).

### Электрические свойства AgFeSbS $_3$ при экстремальных воздействиях

Хейфец О.Л., Нугаева Л.Л., Тебеньков А.В., Шакиров Э.Ф., Мельникова Н.В., Филиппов А.Л.\*

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: afilippov@bk.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 синтезу и исследованию электрических и магнитных свойств AgFeSbS<sub>3</sub> в широком диапазоне температур, давлений и магнитных полей. По данным рентгеноструктурного анализа, синтезированный материал представляет собой смесь двух фаз — FeS и AgSbS<sub>2</sub>.

Исследования температурных зависимостей импеданса проводились с использованием метода импедансной спектроскопии на измерителе–анализаторе импеданса RLC–2010 в области частот 1 кГц– 1 МГц и температур 78–400 К. Для генерации давлений до 48 ГПа использовали камеру высокого давления с наковальнями типа «закруглённый конус–плоскость» из искусственных поликристаллических алмазов «карбонадо» [1].

Годографы импеданса исследованного материала в высокочастотной части могут быть аппроксимированы дугой полуокружности. Температурная зависимость электропроводности AgFeSbS<sub>3</sub> активационного типа, смена энергии активации происходит в области температур 200–210 К. В области температур 110–205 К энергия активации  $E_a = 0.14$  эВ, а в области температур 205–325 К —  $E_a = 0.42$  эВ. Такое поведение сопротивления совпадает с данными исследований на постоянном токе [2]. Диэлектрическая проницаемость AgFeSbS<sub>3</sub> с ростом температуры растет, причем в области смены энергии активации наблюдается изменение скорости роста диэлектрической проницаемости.

Сопротивление уменьшается с ростом давления, в области давлений 10 ГПа и 22–26 ГПа наблюдается изменение скорости падения сопротивления.

Исследование AgFeSbS<sub>3</sub> при высоких давлениях показало, что наблюдается изменение электрических свойств в области давлений 22–26 ГПа, возможно связанное с фазовым переходом. Проведенное сравнение со свойствами образцов AgFeAsSe<sub>3</sub> и AgFeSbSe<sub>3</sub> показало, что замена селена на серу и мышьяка на сурьму не приводит к существенному изменению области возникновения фазового перехода [3].

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке Правительства Свердловской области и РФФИ (грант № 13–02–96033–р\_урал).

- 1. Vereshchagin L.F., Yakovlev E.N., Vinogradov B.V., Stepanov G.N., Bibaev K.Kh., Alaeva T.I., Sakun V.P., High Temperatures–High Pressures **6**, 499 (1974).
- 2. Нугаева Л.Л., Электропроводность, акустические и магнитные свойства сложных халькогенидов и оксидов., дисс.канд.физ.–мат.наук, Свердловск (1987).
- 3. Хейфец О.Л., Нугаева Л.Л., Тебеньков А.В., Волегов А.С., Шакиров Э.Ф., Мельникова Н.В., Филиппов А.Л., Сборник трудов симпозиума «Кристаллография фазовых переходов при высоких давлениях и температурах», Ростов–на–Дону–Лоо, 156 (2012).

# Влияние давлений и низких температур на электрические свойства AgGeSbS<sub>0.9</sub>Se<sub>2.1</sub>

Хейфец О.Л.\*, Мельникова Н.В., Бабушкин А.Н., Нугаева Л.Л., Тебеньков А.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: olgakheifets111@gmail.com

Работа посвящена исследованию электрических свойств сложного халькогенида AgGeSbS<sub>0.9</sub>Se<sub>2.1</sub> при температурах 100–380 К, частотах переменного поля 1 кГц–3 МГц и давлениях 15–45 ГПа. Исследование электрических свойств проводилось на постоянном и переменном токе. Для генерации давлений до 48 ГПа использовали камеру высокого давления с наковальнями типа «закруглённый конус– плоскость» из искусственных поликристаллических алмазов «карбонадо». Для создания магнитного поля камера высокого давления помещалась между полюсов магнита.



Рис. 1. Барические зависимости сопротивления  $AgGeSbS_{0.9}Se_{2.1}$  при нагружении и снятии нагружения в магнитном поле.

Были исследованы годографы импеданса AgGeSbS<sub>0.9</sub>Se<sub>2.1</sub> при разных температурах. Из годографов определены граничные частоты, разделяющие области частот, характеризующих импеданс образца и границы электрод-образец. Для исследований температурных зависимостей электропроводности и диэлектрической проницаемости были выбраны частоты 11 кГц, 21 кГц и 42 кГц, которые лежат выше граничной частоты для всех температур. Температурная зависимость проводимости Аррениусовского типа со сменой энергии активации в разных областях температур. Смена энергии активации происходит в областях температур 210-220 К и 260-270 К в зависимости от частоты. Диэлектрическая проницаемость образца медленно растет до температуры 220 К, после чего на кривой наблюдается максимум в области температур 210-280 К, затем диэлектрическая проницаемость резко возрастает. Область резкого роста диэлектрической проницаемости совпадает с областью смены энергии

активации. Возможно в области температур 210–280 К в образце происходит фазовый переход.

На рис. 1. приведены барические зависимости сопротивления AgGeSbS<sub>0.9</sub>Se<sub>2.1</sub> при давлениях 15– 48 ГПа и магнитных полях до 1 Тл при нагружении и снятии нагружения с образца. Видно, что сопротивление резко падает в области давлений 22–24 ГПа. Зависимости практически совпадают для разных величин магнитного поля. Поведение сопротивления при снятии нагружения аналогично поведению при нагружении. Подобные изменения свойств в области давлений 22–24 ГПа были обнаружены при исследовании барических зависимостей сопротивления на переменном токе. Изменения могут быть связаны с существованием фазового перехода. Проведенное сравнение с образцами AgGeSbS<sub>3x</sub>Se<sub>3(1-x)</sub> с другими соотношениями серы и селена показало, что увеличение доли серы приводит к смещению области существенных изменений электрических свойств в сторону более высоких давлений.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке Правительства Свердловской области и РФФИ (грант № 13–02–96033–р\_урал).

### Электрические свойства $(PbSe)_x(AgAsSe_2)_{1-x}$ (x = 0.2, 0.3)

Хейфец О.Л.\*, Мельникова Н.В., Бабушкин А.Н., Нугаева Л.Л.

#### Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: olgakheifets111@gmail.com

В рамках поиска материалов, сочетающих ионную проводимость с сегнетоэлектрическими свойствами, были синтезированы халькогениды (PbSe)<sub>x</sub>(AgAsSe<sub>2</sub>)<sub>1-x</sub> (x = 0.1-0.9). Данная работа посвящена исследованию электрических свойств сложных халькогенидов (PbSe)<sub>x</sub>(AgAsSe<sub>2</sub>)<sub>1-x</sub> (x = 0.2, 0.3) при температурах 100–400 К и давлениях 15–45 ГПа. По данным рентгеноструктурного анализа, синтезированный материал представляет собой смесь фаз PbSe и AgAsSe<sub>2</sub>.

Из анализа годографов импеданса были определены граничные частоты, разделяющие области частот, характеризующих импеданс образца и границы электрод–образец. Для исследований температурных зависимостей электропроводности и диэлектрической проницаемости были выбраны частоты 11 кГц и 21 кГц, которые лежат выше граничной частоты. Температурная зависимость проводимости образцов Аррениусовского типа со сменой энергии активации в разных областях температур. Смена энергии активации происходит в областях температур 160–170 К, 240–250 К для x = 0.2 и 170–180 К, 230–240 К для x = 0.3. Диэлектрическая проницаемость образца с x = 0.2 медленно растет до температур 220–240 К, а затем начинает быстро возрастать. Для образца с x = 0.3 быстрый рост диэлектрической проинцаемости наблюдается в области температур 240–260 К.

Были исследованы барические зависимости реальной части импеданса образцов при разных частотах при нагружении и снятии нагружения. Для образца с *x* = 0.2 наблюдается аномалия на зависимости сопротивления от давления в области давлений 18–24 ГПа при нагружении и 14–22 ГПа при снятии нагружения с образца. Аналогичные аномалии наблюдаются на барических зависимо-



Рис. 1. Барические зависимости сопротивления (PbSe)<sub>*x*</sub>(AgAsSe<sub>2</sub>)<sub>1-*x*</sub>: x = 0.2 (слева), x = 0.3 (справа).

стях мнимой части сопротивления и тангенса угла диэлектрических потерь. Для образца с *x* = 0.3 наблюдается заметное падение сопротивления до давлений 12–14 ГПа (см. рис. 1).

В результате исследований был сделан вывод, что синтезированные материалы относятся к классу полупроводников. Обнаружены области существенных изменений электрических свойств при высоких давлениях: 16–22 ГПа для x = 0.2 и 12–14 ГПа для x = 0.3. Возможно, изменения электрических свойств связаны со структурными переходами.

Было проведено сравнение свойств (PbSe)<sub>x</sub>(AgAsSe<sub>2</sub>)<sub>1-x</sub> (x = 0.2, 0.3) со свойствами материалов с x = 0.4–0.9 и однофазного соединения с x = 0.5.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке Правительства Свердловской области и РФФИ (гранты № № 13–02–96033–р\_урал, 13–02–96039–р\_урал).
# Проводимость и транспортные явления

## Влияние смешивания анионов на свойства железосодержащих халькогенидных сверхпроводников

Абухасва А.С.<sup>1\*</sup>, Меренцов А.И.<sup>1,2</sup>, Селезнева Н.В.<sup>1</sup>, Баранов Н.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: ali samy1986@yahoo.com

Слоистые железосодержащие соединения, такие как оксипниктиды [1] и халькогениды железа [2], демонстрируют необычную высокотемпературную сверхпроводимость. Среди этих материалов селенид железа имеет достаточно простую кристаллическую структуру типа PbO. Это обстоятельство способствует проведению экспериментальных и теоретических исследований влияния химических замещений в соединениях на основе FeSe, а также воздействия высокого давления, что может привести к лучшему пониманию механизмов сверхпроводимости в соединениях этого класса. Целью данной работы является ответ на вопрос, как присутствие всех трех халькогенов (X = S, Se, Te) в соединении влияет на кристаллическую структуру и сверхпроводящие свойства соединений на основе FeSe.

Поликристаллические образцы с номинальным составом  $Fe_{1.02}Te_{0.5}Se_{0.5-x}S_x$  (Te-0.5 си-(Se-0.5 система) 0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5) были получестема) и Fe<sub>102</sub>Se<sub>05</sub>Te<sub>05-r</sub>S<sub>r</sub> (x= ны твердофазных реакций использованием двух методик. Аттестация методом С образцов выполнялась с помощью рентгеновского дифрактометра Bruker D8 Advance и сканирующей электронной микроскопии (Auriga CrossBeam, CarlZeiss). Электрическое образцов измерялось контактным интервале сопротивление 4–x методом в 6-300 Κ. поведение магнитной восприимчивости изучалось с помощью СКВИД магнитометра MPMS-16

Обнаружено, что замещение теллура серой при сохранении концентрации селена в  $Fe_{1.02}Se_{0.5}Te_{0.5-x}S_x$ , так же как и замещение селена серой при сохранении концентрации теллура [3], расширяет кристаллическую решетку, несмотря на то, что сера имеет меньший радиус по сравнению с теллуром и селеном. Однако увеличение объема элементарной ячейки при замещении в Те-0.5 системе выше, чем в Se-0.5 системе (вставка на рис. 1), по-видимому, из-за большей разницы в ионных радиусах Те и S по сравнению с ионными радиусами Se и S. Установлено, что существует хорошая корреляция между скоростью уменьшения критической температуры T<sub>c</sub> и увеличением параметров решетки при замещениях в обеих исследуемых системах: чем выше скорость увеличения параметров решетки, тем выше скорость подавления Т<sub>с</sub>.

XL7.



Рис. 1. Зависимость критических температур от концентрации серы (*x*). Сравнение между системами Те–0.5 и Se–0.5. На вставке показано зависимость объёма элементарной ячейки от (*x*).

- 1. Kamihara Y. et al., J. Am. Chem. Soc. 130, 3296 (2008).
- 2. Hsu F.C. et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 38, 14262 (2008).
- 3. Abouhaswa A.S. et al., Physica C: Superconductivity and its Applications 502, 10 (2014).

#### Особенности сопротивления в параллельном плоскости гетероструктуры магнитном поле

Боголюбский А.С.\*, Неверов В.Н., Гудина С.В., Клепикова А.С.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: sendit2here@yandex.ru

Зависимость сопротивления (проводимости тока) от продольного магнитного поля, возникающая из–за конечных размеров реальных двумерных структур (толщин слоев), является следствием подавления туннелирования между ямами в системах с двойными квантовыми ямами [1], эффекта слабой локализации, обусловленного наличием шероховатостей границ гетероперехода [2], а также диамагнитным сдвигом уровней размерного квантования. Нами обнаружено, что влияние продольного магнитного поля на проводимость тока двумерных систем не ограничивается перечисленными эффектами.

Когда электрический ток направлен перпендикулярно магнитному полю, действие силы Лоренца приводит к эффекту Холла (магнитное поле нормально к плоскости двумерной системы). Если движение носителей заряда ограничено пространственным квантованием в направлении действия силы Лоренца (магнитное поле параллельно плоскости системы), то это приводит к разной вероятности найти электрон у верхней и нижней гетерограницы квантовой ямы (изменяется вид плотности вероятности волновой функции в квантовой яме). Если рассеяние носителей заряда у верхней и нижней гетерограницы квантовой ямы отличается, то величина сопротивления при пропускании тока в одном и другом направлении будет различаться. Очевидно, что этот эффект будет нечетным по магнитному полю. В случае, когда ток сонаправлен с магнитным полем, данного эффекта не будет.



Рис. 1. График зависимости сопротивления от магнитного поля.

В данной работе исследованы двумерные структуры с двойной квантовой ямой n-GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs. Проведены измерения при температуре T = 4.2 К в магнитном поле до 6 Тл, направленном вдоль плоскости гетероструктуры. Ток плотностью  $\sim 160$  А/см<sup>2</sup> был направлен перпендикулярно направлению магнитного поля. При исследовании гетероструктур n-InGaAs/GaAs в продольном магнитном поле, когда ток направлен перпендикулярно полю, наблюдалась несимметричность магнитосопротивления при изменении направления магнитного тока.

На рис. 1 представлены зависимости  $R_{xx}$  (Ом) сопротивления для двух направлений тока I + u I - в магнитных полях B от -5до 5 Тл. Наблюдается анизотропия магнитного поля в зависимости от направления тока. Видно, что эффект нечетный относительно магнитного поля. При измерениях, когда магнитное поле было направлено по направлению тока, данный эффект был более чем на порядок меньше. По величине эффекта можно сделать вывод, что величина рассеяния у гетерограницы со стороны подложки меньше, чем со стороны поверхности структуры.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № 0120146330 (проект №№ 12-П-2-1051 и 14-2-НП-33) и при поддержке РФФИ (проекты №№ 14-02-31164 и 14-02-00151). 1. Mensz P.M., Wheeler R.G., Phys. Rev. B **35**, 1929 (1987).

2. Palevski A., Beltram F., Capasso F., Pfeiffer L., West K., Phys. Rev. Lett. 65, 2844 (1990).

#### Измерение коэффициентов диффузии дейтерия в протонных проводниках при помощи методики NRAOL (анализ ядерными реакциями «онлайн»)

Выходец В.Б.<sup>1</sup>, Курённых Т.Е.<sup>1</sup>, Нефёдова О.А.<sup>2</sup>, Обухов С.И.<sup>1\*</sup>, Выходец Е.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт машиноведения УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>3</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: obuhovsvii@imp.uran.ru



Рис. 1. Зависимости концентрации c(x) дейтерия от глубины x в образце. Кривые 1–4 соответствуют различным временам облучения образцов.

Обычно данные по подвижности ионов водорода в оксидных протонных проводниках получают из протонной проводимости. Существует мало данных по коэффициентам диффузии водорода/дейтерия, полученных прямым методом. Для дополнительной информации о механизме протонной миграции в протон– проводящих оксидах важно провести измерение коэффициентов диффузии прямым методом, основанным на уравнениях Фика.

Для выполнения этих измерений была разработана новая методика — анализ при помощи ядерных реакций «онлайн» (Nuclear Reaction Analysis On–line). Обычно ионная имплантация, создающая источник диффузии, диффузионный отжиг образцов и измерение диффузионного распределения выполняются последовательно, одно за другим — не предполагается значительной диффузии во время имплантации, хранения образцов и после измерения диффузионного распределения. Но этот подход нельзя использовать в случаях очень быстрой

диффузии атомов дейтерия при комнатной температуре. Предлагаемая методика работает в режиме реального времени (анализ ядерными реакциями «онлайн»): три процесса идут одновременно — имплантация ионов дейтерия, их диффузия и измерение распределения концентрации атомов D по глубине. Было получено решение неоднородного уравнения Фика для начальных и граничных условий задачи диффузии, поставленной в работе. Для оксида La<sub>0.9</sub>Sr<sub>0.1</sub>ScO<sub>3</sub>H<sub>0.1</sub> мы получили коэффициенты диффузии дейтерия при комнатной температуре:  $D = 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}.$ 

Работа была поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (грант № 13–03–00310).

1. Выходец В.Б., Курённых Т.Е., Горелов В.П., Балакирева В.Б., Выходец Е.В., Обухов С.И., Письма в ЖЭТФ **97**, 11 (2013).

#### Аномальные гальваномагнитные эффекты в селениде ртути с примесями 3*d*-переходных металлов

Дерюшкин В.В.\*, Бобин С.Б., Окулов В.И., Лончаков А.Т., Говоркова Т.Е.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: vvd1992@gmail.com

Исследованные в настоящей работе системы интересны тем, что в них наблюдается теоретически предсказанное в [1] явление спонтанной спиновой поляризации, связанное с резонансным рассеянием электронов на примесях переходных элементов в селениде ртути. Экспериментальным подтверждением спонтанной спиновой поляризации в кристаллах HgSe:3*d* является наблюдение аномального эффекта Холла (АЭХ) [2]. В данной работе представлены результаты исследования магнетосопротивления (МС) и эффекта Холла при комнатной температуре для образцов HgSe, легированных примесями Fe, Co, Ni, Cr, V. Измерения были выполнены стандартным четырехзондовым методом на постоянном токе.

Впервые на фоне положительного MC, связанного с поправками на неполное вырождение электронного газа, в MC кристаллов HgSe:3*d* были обнаружены гистерезисные явления с долговременными (десятки часов) процессами релаксации гистерезисного вклада. На рис. 1 представлена характерная зависимость испытывающего гистерезис поперечного MC  $\Delta \rho_{xx}/\rho_0$  от магнитного поля на примере образца HgSe:Ni.



Рис. 1. Зависимость  $\Delta \rho_{xx} / \rho_0$  от магнитного поля *H* для образца HgSe:Ni с концентрацией  $N_{\rm Ni} = 1 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup>. На вставке: гистерезис в режиме непрерывного ввода (темные кружки) и вывода (светлые кружки) магнитного поля.

Как показал эксперимент, для образцов HgSe:3d, обладающих изотропным электронным спектром, величина остаточного сопротивления (точка А на рис. 1) не зависит от предыстории (направления ввода-вывода магнитного поля) и его ориентации относительно кристаллографических осей. что гистерезисный Установлено, вклад в МС отсутствует в области насыщения аномального вклада в эффект Холла, связанного с насыщением намагниченности спин-поляризованных электронов. Данная корреляция указывает на связь гистерезисного вклада с долговременными процессами релаксации неравновесной намагниченности системы спонтанно поляризованных электронов.

Таким образом, нами обнаружен гистерезис в MC кристаллов HgSe:3*d*, который, также как и AЭX, является характерным свойством этих систем, зависящим от долговременной релак-

сации поляризованных электронных спинов. Это свойство может быть полезным при разработке актуальных для полупроводниковой спинтроники инжекторов спин–поляризованных электронов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 12–02–00530 и программы ОФН РАН № 12–Т–2–1016.

1. Окулов В.И., Памятных Е.А., Силин В.П., ФНТ **37**(9/10), 1001 (2011).

2. Лончаков А.Т., Окулов В.И., Говоркова Т.Е. и др., Письма в ЖЭТФ 96(6), 444 (2012).

# Влияние высоких давлений на электро– и магнитосопротивление $(InSe)_x(CuAsSe_2)_{1-x}, x = 0.05$

Зайкова В.Е.\*, Мельникова Н.В., Курочка К.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: vasilisazaykova@gmail.com

Изучение влияния высоких давлений на физические свойства анизотропных материалов является актуальным с прикладной и теоретической точек зрения [1]. Работа посвящена изучению влияния высоких давлений (до 50 ГПа) на электро– и магнитосопротивление поликристаллического материала (InSe)<sub>x</sub> (CuAsSe<sub>2</sub>)<sub>1-x</sub>, x = 0.05. Рентгеноструктурные исследования (Shimadzu XRD 7000) показали, что материал кристаллизуется в кубической сингонии (структура типа сфалерита) с параметром ячейки 0.553 нм. При атмосферном давлении материал проявляет активационный характер электропроводности. Высокие давления создавали в камере высокого давления с наковальнями типа «закругленный конус–плоскость» из проводящих синтетических алмазов типа «карбонадо», метод контролирования давления и калибровка камеры подробно описаны в работах [2,3]. Измерения магнитосопротивления проводили после установления стационарного режима при фиксированном давлении в поперечном магнитном поле (0.2 < *B* < 1 Тл), создаваемым панцирным магнитом, при комнатной температуре.

С увеличением давления от 15 до 50 ГПа электросопротивление образца уменьшается на три порядка. Резкое изменение электросопротивления (на порядок) наблюдается в области давлений от 18 ГПа до 20 ГПа, при 24 ГПа наблюдается некоторая особенность поведения электросопротивления — небольшой пик. При дальнейшем увеличении давления от 24 ГПа до 38 ГПа электросопротивление монотонно убывает, и практически не изменяется при дальнейшем возрастании давления до его максимального в эксперименте значения. На зависимости магнитосопротивления от давления наблюдаются особенности — смена знака с положительного на отрицательный при увеличении давления в окрестности 27 ГПа, ярко выраженные экстремумы — при 26 ГПа, в области 28-32 ГПа и при 38 ГПа. Выявленные особенности барических зависимостей электрических характеристик  $(InSe)_x(CuAsSe_2)_{1-x}$ , x = 0.05, аналогичны поведению электрических параметров материала  $(GeSe)_x(CuAsSe_2)_{1-x}$ , x = 0.05. В нем также наблюдали осыбенности в поведении таких электрических свойств, как электросопротивление, термоэдс, тангенс угла потерь, но в барических областях, смещенных в сторону больших величин давлений [4] по отношению к полученным интервалам для исследуемого соединения. Наблюдаемые особенности барических зависимостей электрических характеристик обоих материалов и смещение областей давлений, в которых происходят заметные изменения в поведении электрических свойств при замене германия на индий, могут быть обусловлены причинами, связанными с изменением кристаллической структуры и различием ионных радиусов индия и германия.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 13-02-00633.

- 1. Мельникова Н.В., Хейфец О.Л., Бабушкин А.Н., Курочка К.В., Сенсорная электроника и микросистемные технологии 1, 52 (2010).
- 2. Verechagin L.F., Yakovlev E.N., Stepanov G.N. et al., JETP Lett. 16, 240 (1972).
- 3. Babushkin A.N., High Presser Research 6, 349 (1992).
- 4. Мельникова Н.В., Бабушкин А.Н., Савина О.В., Физика и техника высоких давлений 19, 63 (2009).

#### Скейлинг в режиме квантового эффекта Холла в гетероструктуре *n*–InGaAs/GaAs с одиночной квантовой ямой

Клепикова А.С.\*, Неверов В.Н., Шелушинина Н.Г., Арапов Ю.Г., Гудина С.В., Якунин М.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: as\_klepikova@mail.ru

Квантовый эффект Холла (КЭХ) можно рассматривать как последовательность квантовых фазовых переходов между локализованными и делокализованными состояниями в спектре неупорядоченной 2*D* системы в квантующем магнитном поле. В рамках концепции скейлинга [1] ширина перехода между соседними плато КЭХ должна стремиться к нулю при уменьшении температуры по степенному закону *T*<sup>к</sup>, где к — критический индекс.

Проведены измерения продольного  $\rho_{xx}(B)$  и холловского  $\rho_{xy}(B)$  магнитосопротивлений в режиме КЭХ, и исследована температурная зависимость ширины переходов плато–плато  $v_0(T)$  в гетероструктуре *n*–InGaAs/GaAs с одиночной квантовой ямой в диапазоне магнитных полей  $B = (0 \div 16)$  Тл и температур  $T = (0.4 \div 4.2)$  К до и после подсветки инфракрасным светом.

Зависимость ширины перехода с первого на второе плато КЭХ от температуры для незасвеченного образца *n*–InGaAs/GaAs описывается линейной зависимостью  $v_0(T) = \alpha T + \beta$  с параметрами  $\alpha = 0.031 \pm 0.002$  и  $\beta = 0.034 \pm 0.007$ . В настоящее время считается, что линейная по температуре зависимость  $v_0(T)$  является квазиклассической по природе и может наблюдаться в образцах с медленно меняющимся потенциалом (крупномасштабный потенциал) [2] или в неоднородных по концентрации образцах [3].

После воздействия ИК–излучения, которое приводит к существенному возрастанию как концентрации, так и подвижности электронов (и тем самым к улучшению однородности образца), экспериментальные данные описываются степенной зависимостью  $v_0(T) \sim (T/T_0)^{\kappa}$  с  $\kappa = 0.25 \pm 0.02$  (при  $T = (0.4 \div 1.8)$  К) и  $\kappa = 0.70 \pm 0.12$  (при  $T = (2.6 \div 4.2)$  К) при температуре кроссовера  $T_{cross} \cong 2$  К. Отметим, что наблюдаемое при низких температурах значение  $\kappa = 0.25 \pm 0.02$  достаточно хорошо соответствует оценкам теоретических работ для *короткодействующего* потенциала электрон–электронного взаимодействия,  $\kappa_{teor} = 0.21$  [4].

Таким образом, обнаруживается неуниверсальный скейлинговый режим при сравнительно высоких температурах,  $T > T_{cross}$ , и универсальный скейлинговый режим при низких температурах,  $T < T_{cross}$ . Такое поведение интерпретируется как переход от процесса термического возбуждения через потенциальные барьеры в различных седловых точках при  $T > T_{cross}$  к процессу квантового туннелирования при  $T < T_{cross}$ . Универсальный скейлинг становится наблюдаемым лишь при достаточно низких температурах, когда длина фазовой когерентности  $L_{\varphi}$  превышает типичный размер флуктуаций примесного потенциала (потенциала беспорядка) и преобладают процессы когерентного туннелирования [5].

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № 01201463330 (проекты №№ 12–П–2–1051 и 14–2–НП–33) и при частичной поддержке РФФИ, гранты №№ 14–02–31164, 14–02–00151.

1. Pruisken A.M.M., Phys. Rev. Lett. 61, 1297 (1988).

2. Pruisken A.M.M., de Lang D.T.N., Ponomarenko L.A. et al., Solid State Commun. 137, 540 (2006).

3. Karmakar B., Gokhale M.R., Shah A.P. et al., Physica E 24, 187 (2004).

4. Pruisken A.M.M., Baranov M.A., Europhys. Lett. 31, 543 (1995).

5. Li W., Xia J.S., Vicente C., Sullivan N.S. et al., Phys. Rev. B 81, 033305 (2010).

#### Ионная проводимость керамических фаз на основе сложных оксидов сурьмы

Лупицкая Ю.А.\*, Новикова В.Ф., Филоненко Е.М.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия \*e-mail: lupitskaya@gmail.com

Получение керамических материалов с ионопроводящими свойствами является одной из актуальных задач. Особый интерес представляют сложные оксиды сурьмы с большой разупорядоченностью катионной подрешетки, устойчивые в широком температурном интервале, носителями заряда в которых являются ионы щелочных металлов [1]. Получить такие соединения можно путем твердофазного синтеза в системе, содержащей карбонаты одновалентных металлов, азотнокислое серебро, оксиды сурьмы и вольфрама при нагревании [2].

Фазовый состав образцов исследовали методами дериватографии и рентгеновского анализа. Измерения ионной проводимости на переменном токе проводили с помощью моста переменного тока P–5083 при частоте 10<sup>2</sup>–10<sup>5</sup> Гц.

Из данных рентгеновского анализа следует, что при прокалке на воздухе (T = 1123 K) в данной оксидной системе образуются фазы состава  $Me_x K_{y-x} Sb_y W_{2-y} O_6$  (Me = K, Na, Li, Ag) в интервале изменения ( $0 \le x \le y$ ;  $1.0 \le y \le 1.375$ ), кристаллизующиеся в рамках структуры типа пирохлора Fd3m. Методом Ритвельда проведено уточнение фазового состава образцов на основе сложных оксидов сурьмы (рис. 1).

Для соединений антимонатвольфраматов  $Me_{0.4}$  K<sub>0.6</sub>SbWO<sub>6</sub> (Me =K, Na, Li, Ag) в температурном интервале 500–1000 К приведена зависимость логарифма удельной проводимости от обратной температуры (рис. 2).



Рис. 1. Рентгеновская дифрактограмма фазы состава KSbWO<sub>6</sub>, полученной при температуре 1123 К.



Рис. 2. Зависимость логарифма удельной проводимости образцов от обратной температуры.

Сравнение проводимости антимонатвольфрамата калия KSbWO<sub>6</sub>(K<sub>0.4</sub>K<sub>0.6</sub>SbWO<sub>6</sub>) и фаз, допированных ионами натрия Na<sub>0.4</sub>K<sub>0.6</sub>SbWO<sub>6</sub>, лития Li<sub>0.4</sub>K<sub>0.6</sub>SbWO<sub>6</sub> и серебра Ag<sub>0.4</sub>K<sub>0.6</sub>SbWO<sub>6</sub>, с одинаковым соотношением ионов Sb(V) и W(VI) при фиксированной температуре 800 К показывает, что наибольшая величина проводимости и наименьшая энергия активации наблюдаются для фаз, содержащих ионы лития (рис. 2, а).

Кроме того, в докладе обсуждается модель заполнения ионами кристаллографических позиций по правильной системе точек структуры типа пирохлора и механизм ионного транспорта в полученных соединениях.

1. Лупицкая Ю.А., Бурмистров В.А., Неорган. материалы 49, 9, 930 (2013).

2. Лупицкая Ю.А., Бурмистров В.А., Ж. неорган. химии 56, 2, 290 (2011).

# Влияние замещения титана ванадием на электрические свойства $CaCu_{3}Ti_{4}O_{12}$

Мирзорахимов А.А.<sup>1</sup>\*, Мельникова Н.В.<sup>1</sup>, Кадырова Н.И.<sup>2</sup>, Устинова И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: xomi4ev@mail.ru

Среди материалов, обладающих гигантскими значениями диэлектрической проницаемости, выделяется  $CaCu_3Ti_4O_{12}$ , который обладает кубической кристаллической структурой и имеет высокую диэлектрическую постоянную ( $10^4-10^5$ ) в широком интервале температур [1-3]. В настоящее время причины проявления гигантской диэлектрической проницаемости до конца не изучены. Исследование влияния условий синтеза, термобарической обработки, легирования будет способствовать нахождению ответа на данный вопрос. Целью настоящей работы является изучение влияния замещения титана ванадием в материале CaCu\_3Ti\_4O\_{12} на структурные характеристики и электрические свойства образцов.

Новые материалы СаСu<sub>3</sub>Ti<sub>4-x</sub>V<sub>x</sub>O<sub>12</sub>, где x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, синтезированы в условиях высоких давлений и температур ( $P \sim 10$  ГПа,  $T \sim 1000^{\circ}$ С,  $t \sim 10-15$  мин). Метод синтеза подробно описан в работе [4]. Рентгеноструктурные исследования (Shimadzu XDR–7000, Си<sub>Ka</sub>–излучение) показали, что все полученные фазы кристаллизуются в кубической симметрии и имеют перовскитоподобную структуру.

Электрические свойства оксидов исследованы методом импедансной спектроскопии в диапазоне частот от 1 Гц до 30 МГц (Solartron 1260A) при температуре от 300 К до 600 К в ячейке ProboStat, а также на постоянном токе (комплекс Solartron Analytical Modulab).

Микроструктурные и рентгеноструктурные исследования образцов показали, что при постепенном замещении титана ванадием в системе  $CaCu_3Ti_{4-x}V_xO_{12}$  уменьшается размер зерен, параметр решетки уменьшается. Анализ годографов импеданса, частотных зависимостей диэлектрической проницаемости, вещественной части комплексной удельной проводимости, температурных зависимостей диэлектрической проницаемости, электропроводности фаз высокого давления  $CaCu_3Ti_{4-x}V_xO_{12}$  показал, что увеличение количества ванадия приводит к уменьшению энергии активации электропроводности, росту электропроводности, которая не зависит от частоты в интервале 100 Гц–1 МГц. Диэлектрическая постоянная исследованных материалов имеет значения от  $10^3$  до  $10^4$ и фактически остается неизменной в широком частотном интервале ( $10^3$ – $10^7$  Гц). Для того чтобы объяснить причины возникновения гигантской диэлектрической постоянной, нужны более детальные комплексные исследования материалов. На данный момент можно сказать, что наличие высокой диэлектрической постоянной определяется, скорее всего, не эффектами, связанными с микроструктурными особенностями (размер зерен, площадь поверхности зерен и т.д.), а локальными дипольными моментами, связанными со смещением ионов Ti от центра [5].

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ № 13–02–00633 и УрО РАН № 12–U–3–1013.

1. Subramanian M.A., Li D., Duan N., Reisner B.A., Sleight A.W., J. Solid State Chem. 151, 737 (2000).

2. Li T., Chen Z., Chang J., Hao J., Zhang J., J.Mater. Sci. 44, 6149 (2009).

3. Kwon S., Cann D.P., J. Electroceram. 24, 231 (2010).

4. Kadyrova N.I., Zaynulin Yu.G., Volkov V.L. et al., Russian Journal of Inorganic Chemistry 53, 1542 (2008).

5. Ke, S.M., Huang, Y.N., and Fan, H.Q., Appl. Phys.Lett. 89, 182904 (2006).

#### Анализ кинетики тока в наноструктурированных полупроводниках в рамках модели электронного транспорта

Сибатов Р.Т., Морозова Е.В.\*

Ульяновский государственный университет, Ульяновск, Россия \*e-mail: kat-valezhanina@yandex.ru

В работе теоретически исследуется дисперсионный перенос в неупорядоченных наноструктурированных полупроводниках с учетом энергетического беспорядка и перколяционного характера траекторий. Известно, что линейные версии модели переноса путем многократного захвата и нестационарной прыжковой проводимости успешно формализуются в рамках единой модели случайных блужданий с непрерывным временем (СБНВ–модели) [1]. Распределение энергий локализованных состояний (ЛС) и расстояний между ними приводит к распределению  $\Psi(t)$  времен локализации. Совместное влияние топологического и энергетического беспорядка на кривые переходного тока рассмотрено в рамках СБНВ–модели [1] по гребешковой структуре, моделирующей перколяционный кластер.

Для СБНВ на гребешковой структуре, рассмотренной в [2] (хребет вдоль *x* и гребешки вдоль *y*, длина гребешков распределена по степенному закону с показателем  $0.5 < \beta < 1$ ), получено уравнение:

$$s^{\gamma} \left( \frac{\tilde{\Psi}(s)}{\tilde{\psi}(s)} \right)^{\gamma} \tilde{p}(x,s) + C \frac{\partial}{\partial x} \tilde{p}(x,s) - D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{p}(x,s) = N s^{\gamma-1} \left( \frac{\tilde{\Psi}(s)}{\tilde{\psi}(s)} \right), \quad \gamma = \frac{1+\beta}{2}, \tag{1}$$

где  $\psi(t)$  и  $\Psi(t)$  — плотность и дополнительная функция распределения времен пребывания в ловушках,  $\tilde{\psi}(s)$  и  $\tilde{\Psi}(s)$  — их образы Лапласа,  $p(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, y, t) dy$  — одномерная плотность дырок, C и D — эффективные коэффициенты адвекции и диффузии.

С помощью полученного уравнения анализируются результаты время–пролетных экспериментов (ВПЭ) в органических и нанопористых полупроводниках. Путем решения уравнения (1) с начальными и граничными условиями для ВПЭ найдено обобщенное выражение для преобразования Лапласа переходного тока:

$$\tilde{I}(s) = \frac{e v_{\rm d} N}{L s^{\gamma} \left(\tilde{\Psi}(s) / \tilde{\psi}(s)\right)^{\gamma}} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{L}{v_{\rm d}} s^{\gamma} \left(\tilde{\Psi}(s) / \tilde{\psi}(s)\right)^{\gamma}\right) \right\}.$$
(2)

Здесь N — поверхностная плотность инжектированных носителей,  $v_d(C, D)$  — средняя скорость движения носителей вдоль поля, L — толщина образца,  $\gamma$  — показатель степенной асимптотики распределения времен пребывания в «мертвых ветвях» перколяционного кластера [2]. Рассчитывается кинетика переходного тока для различных плотностей ЛС (экспоненциального, гауссова, прямоугольного и смешанного типа) с учетом влияния перколяционного характера траекторий. Обсуждается возможность построения алгоритмов восстановления плотности ЛС с учетом перколяции на основе результатов ВПЭ.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ.

1. Scher H., Montroll E.W., Phys. Rev. B 12, 2455 (1975).

2. Лубашевский И.А., Землянов А.А., ЖЭТФ 114, 5447 (1998).

# Зонная структура и электрические характеристики диодных $n^+$ –SiGe/Si/p–SiGe гетероструктур в условиях интенсивной засветки короткой Si базы оптическими импульсами

Орлов М.Л., Орлов Л.К.\*

Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия \*e-mail: orlov@ipmras.ru

В рамках диффузионно-дрейфового приближения изучены особенности протекания тока в диодной  $n^+$ –Si<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>/n–Si/p–Si<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub> гетеросистеме в условиях предельно высокого уровня засветки структуры лазерными импульсами. Задача актуальна в связи с широко обсуждаемыми проблемами современной быстродействующей оптоэлектроники. Без оптического возбуждения вероятность формирования потенциального барьера для электронов в окрестности  $n^+$ -Si<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>/n-Si интерфейса между верхним легированным слоем твердого раствора и упруго напряженным базовым слоем кремния нанометровой толщины становится достаточно высокой для слоев с уровнем легирования  $N_{\rm D} \ge 10^{18}$  см<sup>-3</sup>. При уровне легирования ~  $10^{18}$  см<sup>-3</sup> ширина (на полувысоте) формируемого в окрестности интерфейса барьера для релаксированной Si/Si<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub> гетеросистемы составляет несколько нанометров при глубине Si квантовой ямы около 180 мэВ. Зависимость характеристик барьера от различных параметров структуры: уровня легирования верхнего барьерного слоя, состава слоев твердого раствора, степени деформации слоя кремния, определяемой различной степенью пластической релаксации буферного SiGe слоя, детально ранее изучались в работах [1,2]. Рассматриваемая модель позволяет провести анализ влияния концентрации неравновесных носителей заряда, возбуждаемых импульсом света, в слоях структуры, на характер распределения носителей между слоями и их накопления в базовом слое Si, а также на вид потенциала, определяющего структуру энергетических зон. Показано, что при высоком уровне фотовозбуждения, когда концентрация неравновесных носителей становится сравнимой с концентрацией равновесных электронов в системе, имеет место не только принципиальное изменение структуры зон (при высоком уровне фотовозбуждения системы практически меняется тип гетероперехода), но и возможно формирование в Si канале транзистора достаточно плотной двумерной квазинейтральной электронно-дырочной плазмы. В условиях высокого уровня возбуждения за счет пространственного заряда свободных носителей в слое кремния одновременно формируются квантовые ямы как для электронов, так и для дырок. Вследствие поднятия дна зоны проводимости в базовом слое Si роль барьеров на границах в зоне проводимости возрастает вследствие повышения вероятности их туннельного прокола через пограничные состояния. На практике особенности распределения потенциала и плотности заряда в слоях структуры могут быть определены из анализа характера протекания тока в системе. Наиболее важной характеристикой является зависимость величины протекающего по структуре тока от уровня ее засветки импульсами оптического излучения при заданной разности потенциалов между контактами. Анализ поведения тока в системе от степени засветки структуры показывает, что накопление неравновесных электронов и дырок в базе диода приводит к сильной неоднородности внутреннего поля и, соответственно, к перераспределению падения напряжения между различными областями структуры. При этом на ВАХ структуры могут появляться участки отрицательной дифференциальной проводимости, обусловленные эффективным перераспределением потенциала между отдельными слоями структуры.

1. Orlov L.K., Mel'nikova A.A., Orlov M.L., Alyabina N.A., Ivina N.L., Neverov V.N., Horvath Zs.J., Physica E: Low Dimensional Systems & Nanostructures **51**, 87 (2013).

2. Орлов М.Л., Хорват Ж., Ивина Н.Л., Неверов В.Н., Орлов Л.К., ФТП 48, 970 (2014).

#### Влияние легирования на изменение симметрии спаривания электронно–легированного сверхпроводника Nd<sub>2-x</sub>Ce<sub>x</sub>CuO<sub>4+δ</sub> вблизи границы антиферромагнитной фазы

Петухова О.Е.<sup>1\*</sup>, Чарикова Т.Б.<sup>1</sup>, Шелушинина Н.Г.<sup>1</sup>, Петухов Д.С.<sup>1</sup>, Иванов А.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Московский государственный инженерно-физический институт, Москва, Россия \*e-mail: oep@yandex.ru

В работе приведены результаты исследований удельного сопротивления  $\rho(T)$  в магнитных полях до 90 кЭ в интервале температур 0.4–40 К для недолегированного (x = 0.14) и оптимально легированного (x = 0.15) соединения  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4+\delta}$  с различной степенью отжига. Исследования проводились на монокристаллических пленках  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4+\delta}$ /SrTiO<sub>3</sub>, изготовленных методом импульсного лазерного осаждения. Кроме того, для образца с x = 0.14 и неоптимальным отжигом была измерена температурная зависимость динамической восприимчивости в переменном магнитном поле частоты 81 Гц и амплитуды 4 Э.

Целью работы было проанализировать изменение симметрии спаривания в электроннолегированных сверхпроводниках  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4+\delta}$  в области легирования x = 0.14-0.15, где имеет место возможное сосуществование сверхпроводимости и антиферромагнетизма.



Рис. 1. Температурные зависимости динамической магнитной восприимчивости для неоптимально отожженного образца  $Nd_{1.86}Ce_{0.14}CuO_{4+\delta}$ .

Из температурных зависимостей действительной  $\chi'$  и мнимой  $\chi''$  частей динамической восприимчивости (рис. 1) можно видеть, что при температуре  $T_c = 18.8$  К и ниже наблюдается диамагнитный оклик. Однако величина удельного сопротивления уменьшается более резко с уменьшением температуры, чем величина  $\chi'$ . Помимо этого, из зависимости  $\chi''(T)$  видно, что с уменьшением температуры постепенно увеличиваются потери энергии. Это подтверждает наличие сверхпроводящих и антиферромагнитных областей [1].

Были найдены зависимости наклона второго критического поля  $h^*$  от параметра беспорядка  $\gamma/k T_{c0}$ . Для образцов с оптимальным легированием наклон  $H_{c2}$  уменьшается с увеличением  $\gamma/k T_{c0}$ , но менее резко, чем для систем с чистым d-волновым спариванием [2]. Для недолегиро-

ванных образцов величина наклона  $H_{c2}$  возрастает с увеличением  $\gamma/kT_{c0}$ , что соответствует анизотропному *s*-волновому спариванию.

Таким образом, можно предположить, что в электронно–легированном сверхпроводнике  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4+\delta}$  реализуется s + id симметрия спаривания, что может быть связано с наличием антиферромагнитных спиновых корреляций вплоть до оптимально легированного состава электронного сверхпроводника.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон» № 01201463326 (проект №12–П–2–1018), при частичной поддержке РФФИ (грант № 12–02–00202).

1. Motoyama E.M., Yu G., Vishik I.M. et al., Nature 445, 186 (2007).

2. Posazhennikova A.I., Sadovskii M.V., Physica C 282–287, 1847 (1997).

#### Температурная зависимость коэффициента Холла в электронно–легированных сверхпроводниках вблизи границы сверхпроводящей и антиферромагнитной фазы

Петухов Д.С.<sup>1</sup>\*, Чарикова Т.Б.<sup>1</sup>, Шелушинина Н.Г.<sup>1</sup>, Харус Г.И.<sup>1</sup>, Петухова О.Е.<sup>1</sup>, Иванов А.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Московский государственный инженерно-физический институт, Москва, Россия \*e-mail: den1221@yandex.ru

В электронно–легированном сверхпроводнике  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4+\delta}$  область антиферромагнитного упорядочения (x < 0.14) и область появления сверхпроводимости ( $x \ge 0.14$ ) находятся в непосредственной близости друг от друга, в отличие от дырочно–легированных сверхпроводников [1]. Исследование области конкуренции или возможного сосуществования сверхпроводимости и антиферромагнетизма позволит лучше понять механизм возникновения сверхпроводимости.

В работе представлены результаты исследования коэффициента Холла  $R_{\rm H}$  и удельного сопротивления  $\rho$  при изменении температуры монокристаллических пленок Nd<sub>2-x</sub>Ce<sub>x</sub>CuO<sub>4+ $\delta$ </sub> /SrTiO<sub>3</sub> с x = 0.14, 0.15 и с различной степенью нестехиометрического беспорядка вследствие различных условий отжига (оптимальный отжиг, неоптимальный отжиг). На установке Quantum Design PPMS (Институт Физики Металлов УрО РАН, Екатеринбург) были проведены измерения температурных зависимостей  $R_{\rm H}$  в различных магнитных полях H = (5-90) к $\beta$  в интервале температур T = (4.2-42) К.



Рис. 1. Зависимости  $R_{\rm H}(T)$  в различных магнитных полях для Nd<sub>1.86</sub>Ce<sub>0.14</sub>CuO<sub>4+ $\delta$ </sub>.

Поведение коэффициента Холла в зависимости от температуры в Nd<sub>1.86</sub>Ce<sub>0.14</sub>CuO<sub>4+ $\delta$ </sub> изучалось различными группами исследователей [2]. Однако процессы переноса носителей заряда при изменении температуры и нестехиометрического беспорядка, в том числе температурная зависимость  $R_{\rm H}$  и  $\rho$  в области появления сверхпроводимости ( $x \ge 0.14$ ), требуют дальнейших исследований.

Ha рис. приведена температурная 1 зависимость коэффициента Холла для Nd<sub>1.86</sub>Ce<sub>0.14</sub>CuO<sub>4+δ</sub> для нескольких магнитных полей. Для магнитных полей больше 30 кЭ  $R_{\rm H} < 0$  и сохраняет знак во всем диапазоне исследованных температур. В магнитных полях 5 и 10 кЭ *R*<sub>H</sub> меняет знак на положительный, и область положительных значений R<sub>H</sub> смещается в область более высоких температур с умень-

шением величины магнитного поля. Полученные зависимости  $R_{\rm H}(T)$  будут проанализированы в рамках модели Бардина–Стефена с учетом сосуществования двух типов носителей.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон» № 01201463326 (проект № 12–П–2–1018), при частичной поддержке РФФИ (грант № 12–02–00202).

1. Motoyama E.M., Yu G., Vishik I.M., Vajk O.P., Mang P.K., Greven M., Nature 445, 186 (2007).

2. Hagen S.J., Smith A.W., Rajeswari M., Peng J.L., Li Z.Y., Greene R.L., Phys. Rev. B 47, 1064 (1993).

#### Квантовый эффект Холла в гетероструктурах на основе теллурида ртути

#### Попов М.Р.\*, Арапов Ю.Г., Гудина С.В., Неверов В.Н., Шелушинина Н.Г., Якунин М.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: rafaelp@yandex.ru

Уже в пионерских работах (см. ссылки в обзоре [1]), посвященных объяснению природы квантового эффекта Холла (КЭХ), было показано, что для существования КЭХ необходимо наличие узких полос делокализованных состояний вблизи центра каждого уровня Ландау (при условии, что все остальные состояния являются локализованными). Переходы между плато на зависимости холловского магнитосопротивления ( $\rho_{xy}(B)$ ) в КЭХ могут быть описаны последовательным прохождением уровня Ферми по полосам локализованных-делокализованных-локализованных состояний, что соответствует квантовым фазовым переходам диэлектрик-металл-диэлектрик. Согласно теории скейлинга [1], ширина перехода  $\Delta B$  между соседними плато  $\rho_{xy}(B)$  и ширина соответствующих им максимумов  $\rho_{xx}(B)$ должны стремиться к нулю по степенному закону *T<sup>k</sup>*, где *k* — критический индекс. При стандартном подходе [2] ширина переходной области  $\Delta v$  ( $v \sim 1/B$  — фактор заполнения) определяется длиной фазовой когерентности  $L_{\varphi} \sim T^{-p/2}$ , p зависит от механизма неупругого рассеяния,  $k = p/2\gamma$ , где  $\gamma$  критический индекс длины локализации носителей заряда. Альтернативное объяснение скейлингового поведения  $\Delta v(T)$  [3] использует представление о прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка для температурно–индуцированной проводимости  $\sigma_{xx}$  в области плато КЭХ. При таком подходе ширина пика оценивается как  $\Delta v \sim (T/T_1)^{k_1}$ , где  $k_1 = 1/\gamma$ . Целью нашей работы было проверить применимость представлений скейлинга для структур HgTe/HgCdTe.

Измерены продольное и холловское сопротивление в режиме КЭХ при T = (2-60) К в магнитных полях до B = 9 Тл на гетеростуктурах HgTe/HgCdTe и проведен анализ полученных данных для перехода плато–плато  $1 \rightarrow 2$  в рамках концепции скейлинга. Показано, что температурная зависимость полуширины  $\Delta v$  пика проводимости описывается степенным законом  $\Delta v \sim T^k$  для T = (2-40) К. Полученное значение  $k = 0.42 \pm 0.04$  согласуется с результатами классической работы [4] для гетероструктур InGaAs/InP. Обнаружено, что в области первого плато КЭХ температурная зависимость  $\sigma_{xx}$  имеет вид  $\sigma_{xx}(T) = \sigma_0 \exp\{-(T_0/T)^{1/2}\}$  с префактором  $\sigma_0 \sim 1/T$ , характерный для прыжковой проводимости. Для T = (2-40) К получено значение  $\gamma = 1.1 \pm 0.2$ .

Результаты, полученные нами, свидетельствуют в пользу гипотезы об универсальности критических индексов для полупроводниковых 2*D*–структур в режиме КЭХ. Для различных веществ области температур, где наблюдаются скейлинговые закономерности, существенно различны: от гелиевых и субгелиевых для структур  $A_3B_5$  [4] до температур порядка 100 К для монослойного графена [5]. В структурах на основе HgTe, исследованных нами, эта область составляет  $T \approx (20-40)$  К (благодаря большой величине циклотронного расщепления уровней Ландау вследствие малости эффективной массы носителей  $m = 0.024m_0$ ).

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № 01201463330 (проект № 12– П–2–1051) и при поддержке РФФИ (проект № 14–02–00151).

- 1. Huckestein B., Rev. Mod. Phys. 67, 367 (1995).
- 2. Pruisken A.M.M., Phys. Rev. Lett. 61, 1297 (1988).
- 3. Polyakov D.G., Shklovskii B.I., Phys. Rev. B 48, 11167 (1993).
- 4. Wei H.P., Tsui D.C., Paalanen M.A., Pruisken A.M.M., Phys. Rev. Lett. 61, 1294 (1988).
- 5. Bennaceur K., Jacques P., Portier F. et al., Phys. Rev. B 86, 085433 (2012).

# Электропроводность, коэффициент Зеебека и их зависимость от содержания кислорода, парциального давления кислорода и температуры для YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6-δ</sub>

Седнев А.Л.\*, Цветов Д.С.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: sovsem\_ne\_master@mail.ru

Сложный оксид YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> является перспективным катодным материалом для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). Он привлекает внимание исследователей из–за своих замечательных свойств, таких как высокая электронная и ионная проводимость, большая подвижность кислорода, небольшой коэффициент термического расширения, близкий к YSZ (Zr<sub>0.9</sub>Y<sub>0.1</sub>O<sub>2</sub>) [1]. Однако для YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> неизвестны такие фундаментальные характеристики, как содержание кислорода и его зависимость от парциального давления кислорода ( $P_{O_2}$ ) и температуры, а также зависимость электропроводности и коэффициента Зеебека от  $P_{O_2}$ , несмотря на то, что являются весьма значимыми, так как напрямую определяют применимость данного соединения как катодного материала в ТОТЭ. Таким образом, настоящая работа направлена на исследование зависимости электропроводности и коэффициента Зеебека от Холь данного давления кислорода и температуры для YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub>.

В настоящей работе образцы оксида  $YBaCo_2O_{6-\delta}$  синтезировали по стандартной глицериннитратной технологии. В качестве исходных веществ использовали металлический кобальт и предварительно прокаленные оксид иттрия  $Y_2O_3$ , карбонат бария  $BaCO_3$ . Заключительный отжиг проводили при температуре  $1100^{\circ}C$  в течение 48 часов. Фазовый состав полученного оксида контролировали рентгенографически.

Методом термогравиметрии (ТГ) была исследована зависимость нестехиометрии YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> от температуры и  $P_{O_2}$ . Абсолютное содержание кислорода YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub>, медленно охлажденного (~ 100°С/час) с 1100°С до комнатной температуры, составило 6 –  $\delta$  = 5.512. Содержание кислорода в интервале T =25–1050°С изменяется в диапазоне 5.10 < 6 –  $\delta$  < 5.48. Интересно отметить, что содержание кислорода в YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> в исследуемом диапазоне температур и давлений изменяется в довольно узком интервале по сравнению с другими аналогичными ему соединениями, например GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> [2].

Четырехконтактным методом были измерены зависимости электропроводности и коэффициента Зеебека от  $P_{O_2}$  в температурном интервале 900–1050°С. Необходимо отметить, что при понижении  $P_{O_2}$  ниже определенного значения при данной температуре электропроводность YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> скачкообразно уменьшается почти на порядок величины. По скачкообразному уменьшению электропроводности была определена граница термодинамической стабильности YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6- $\delta$ </sub> по отношению к понижению  $P_{O_2}$ . Показано, что данный двойной перовскит имеет весьма небольшой интервал устойчивости в температурном диапазоне 900–1050°С.

В интервале термодинамической стабильности  $P_{O_2} = 0.5-10^{-3}$  атм и  $T = 900-1050^{\circ}$ С удельная электропроводность YBaCo<sub>2</sub>O<sub>6-δ</sub> изменяется в диапазоне Log( $\sigma$ , Cм/см) = 1.98–2.02, а коэффициент Зеебека практически не зависит от парциального давления кислорода, его значение составило Q = 14 мВ/К. Положительное значение коэффициента Зеебека, высокое значение общей электропроводности, а также ее уменьшение с возрастанием температуры позволяет заключить, что основным переносчиком заряда являются электронные дырки.

Используя данные ТГ, были построены зависимости удельной электропроводности и коэффициента Зеебека  $YBaCo_2O_{6-\delta}$  от абсолютного содержания кислорода. Было показано, что и коэффициент термоэдм, и электропроводность  $YBaCo_2O_{6-\delta}$  незначительно зависят от нестехиометрии данного соединения.

1. Akahoshi D., Ueda Y., J. of Solid State Chemistry 156, 355 (2001).

2. Tsvetkov D.S., Sereda V.V., Zuev A.Yu., J. of Solid State Ionic 180, 1620 (2010).

#### Структура и ионная проводимость церата бария, допированного редкоземельными металлами

Филоненко Е.М., Лупицкая Ю.А.\*

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия \*e-mail: lupitskaya@gmail.com

Сложные оксиды семейства ABO<sub>3</sub>, имеющие структуру типа перовскита (пространственной группы симметрии Pm3m), являются перспективными функциональными материалами, обладающими ионопроводящими и ионообменными свойствами [1]. Особый интерес представляют соединения на основе церата бария с большой разупорядоченностью катионной и анионной подрешеток, носителями заряда в которых являются ионы редкоземельных металлов и анионы кислорода [2]. Получить такие материалы можно путем твердофазного синтеза в системе BaCO<sub>3</sub>–CeO<sub>2</sub>– $Me_2O_3$  ( $Me=Gd^{3+},Y^{3+}$ , Sm<sup>3+</sup>) при нагревании.

Фазы состава ВаСе<sub>1-*x*</sub> $Me_x$  О<sub>3-б</sub> исследовали методом рентгеновского анализа на дифрактометре D8 ADVANCE («Bruker», Германия). Измерения ионной проводимости на переменном токе осуществляли с помощью измерителя RLC Aktakom AM–3028 при частоте 10<sup>5</sup> Гц.





Рис. 1. Рентгеновская дифрактограмма фазы состава BaGd<sub>0.1</sub>Ce<sub>0.9</sub>O<sub>3.95</sub>, полученной при температуре 1223 К.

Рис. 2. Зависимость логарифма удельной проводимости образцов от обратной температуры.

Из данных термогравиметрического и рентгеновского анализа следует, что при прокалке на воздухе (T = 1223 K) в данной оксидной системе образуются твердые растворы на основе церата бария, кристаллизующиеся в рамках структуры типа перовскита Pm3m. Методом Ритвельда проведено уточнение фазового состава образцов на основе церата бария (рис. 1).

Сравнение проводимости BaCeO<sub>3</sub> и фаз, допированных ионами гадолиния, иттрия и самария, показывает, что наибольшая величина проводимости и наименьшая энергия активации наблюдаются для фазы, содержащей ионы гадолиния BaCe<sub>0.9</sub>Gd<sub>0.1</sub>O<sub>3-δ</sub> (рис. 2, б).

- 1. Medvedev D., Murashkina A. et al., Progress in Materials Science 60, 72 (2013).
- Кузьмин А.В., Горелов А.П., Ваганов Е.Г. и др., Фазовые переходы, термодесорбция газов и электропроводность BaCeO<sub>3</sub> — базового соединения для высокотемпературных протонных проводников, Электрохимия (2005).

#### Влияние способа синтеза на морфологию и диэлектрические свойства материалов

<u>Яковлева Е.<sup>1</sup>\*</u>, Чупахина Т.И.<sup>2</sup>, Мельникова Н.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: melancholy@inbox.ru

Исследование структуры и диэлектрических свойств синтезированных разными методами керамических образцов в системе  $La_{2-x}Sr_xNiO_4$  представляет интерес в связи с обнаружением гигантской диэлектрической проницаемости ( $\epsilon = 10^5$ ) в монокристалле  $La_{15/8}Sr_{1/8}NiO_4$  [1]. В настоящей работе предложены новые пути синтеза твердых растворов  $La_{2-x}Sr_xNiO_4$  — CBC, баротермический, комбинированный, и проанализировано влияние способов синтеза на микроструктуру и диэлектрические свойства полученных материалов.

На основании данных исследования микроструктуры порошков и керамики методами ИК– спектроскопии, электронной микроскопии и рентгенофазового анализа предложены оптимальные методики их получения. Показано, что оптимальным способом синтеза является разложение комплексов металлов с различными органическими кислотами, пиролиз которых приводит к образованию наноразмерных порошкообразных прекурсоров. Обнаружено, что процесс фазообразования завершается при 1000°С независимо от типа промежуточного органического комплекса. Плотность керамических образцов определяется температурой спекания наноразмерных прекурсоров. Установлено, что получение газоплотной керамики возможно в одну стадию обработки в программируемом режиме нагрева 100°C/ч до 1200°C. Впервые синтезированы и аттестованы фазы высокого давления в системе  $La_{2-x}Sr_xNiO_4$ .

Диэлектрические свойства синтезированных материалов исследовали с помощью универсального анализатора частотного отклика Solartron 1260А и системы ModuLab MTS в частотном диапазоне от 1 мГц до 16 МГц. Измерения с точностью 0.1% проводили по группе программно выбранных по частоте точек при амплитуде возбуждающего сигнала 30 мВ. Обнаружено, что электрофизические свойства образцов существенно зависят от их плотности. Анализ поведения диэлектрических свойств образцов с меньшей плотностью, полученных в условиях термообработки при температурах, меньших 1200°С, позволил сделать вывод об отсутствии емкостных элементов в эквивалентной схеме, моделирующей ячейку с образцом. Установлено, что вещественная часть диэлектрической проницаемости материалов, полученных в условиях однократной температурной обработки наноразмерных прекурсоров при 1200°С, не ниже, чем у монокристаллов [1]. Большие значения диэлектрической проницаемости керамических образцов с высокой плотностью указывают на внутренние причины появления высоких ее значений, такие как, например, существование постоянных электрических диполей, вызванных деформацией координационных полиэдров в структуре материала (структура типа K<sub>2</sub>NiF<sub>4</sub> [2]), а не на процессы, связанные с границами зерен и контактными явлениями.

Исследования поддержаны грантами РФФИ №№ 14–03–00103, 13–02–00633 и УрО РАН № 12–Y–3–1016.

1. Krohns S., Lunkenheimer P., Kant Ch., Pronin A.V., Brom H.B., Nugroho A.A., Diantoro M., Loidl A., Applied Physics Letters **94**, 122903 (2009).

2. Ерин Ю., Химия и химики 1, 16 (2009).

Резонансные явления

#### Радиопоглощающие материалы на основе антисегнето–, сегнетоэлектрических композиций

#### Абубакаров А.Г.

### Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия e-mail: agabubakarov@sfedu.ru

В последнее время в материаловедении акцент сделан на «зелёные» технологии — разработку целевых материалов, не содержащих токсичные элементы, прежде всего, свинец. Это связано с тем, что свинец относится к числу чрезвычайно токсичных элементов и возглавляет перечень приоритетных особо вредных веществ 1 класса опасности. Именно поэтому особое внимание исследователей нами, прежде всего, обращено на бессвинцовые композиции, в том числе на основе АСЭ (антисегнетоэлектрики) ниобата натрия, NaNbO<sub>3</sub>. Учитывая, что диссипативные характеристики таких материалов существенным образом зависят от термодинамической предыстории (условий получения), целью настоящей работы явилось установление закономерностей формирования спектров СВЧ (сверхвысокие частоты) — поглощения в поляризованных и неполяризованных образцах TP (твердые растворы) системы Na<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>NbO<sub>3</sub> (0.00  $\leq x \leq 0.14$ ), полученных по керамической технологии с применением извне приложенного давления (горячее прессование, ГП) и без него (обычная керамическая технология, OKT).

Двухстадийным твердофазным синтезом с последующим спеканием по обычной керамической технологии приготовлены ТР бинарной системы Na<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>NbO<sub>3</sub> ( $x = 0.00 \div 0.14$ ,  $\Delta x = 0.01$ ), в которой NaNbO<sub>3</sub> — ACЭ с температурой Кюри  $T_{\rm C} \sim 370^{\circ}$ C, а LiNbO<sub>3</sub> — CЭ с  $T_{\rm C} \sim 1200^{\circ}$ C, и изучены их диссипативные характеристики в диапазоне частот ( $1.0 \div 9.0$ ) ГГц. ТР синтезированы методом твердофазных реакций из соответствующих оксидов и карбонатов обжигом в две стадии с промежуточным помолом при температурах  $T_1 = (850 \div 880)^{\circ}$ C,  $T_2 = 870^{\circ}$ C и временах изотермических выдержек  $\tau_1 = \tau_2 = 6$  часов. В дальнейшем все столбики подвергались резке и шлифовке с целью получения образцов в виде дисков диаметром 10 мм и толщиной 1 мм.

Экспериментальные исследования диссипативных свойств изготовленных материалов проводились в диапазоне частот (1.0 ÷ 9.0) ГГц и снимались на анализаторе цепей Е8363В (10 ÷ 40) ГГц. В качестве основного параметра, характеризующего СВЧ поглощение ЭМИ (электромагнитное излучение) объектами исследования, выбран элемент матрицы рассеяния ( $S_{21}$ ), введённой специально для анализа СВЧ цепей. Методика его определения основана на представлении МПЛ (микрополосковая линия) в виде четырехполюсника, при этом для определения элемента  $\dot{S}_{11}$  необходимо измерить модуль и фазу коэффициента отражения от входа исследуемого четырёхполюсника при включении на выходе его согласованной нагрузки:  $\dot{S}_{11} = |\dot{S}_{11}| e^{j\varphi_{11}}$ . Элемент  $\dot{S}_{22}$  определяют аналогичным способом, но при обратном включении четырёхполюсника:  $\dot{S}_{22} = |\dot{S}_{22}| e^{j\varphi_{22}}$ . Для определения элементов  $\dot{S}_{21}$  и

 $\dot{S}_{12}$  нужно измерить комплексные коэффициенты передачи четырёхполюсника при прямом и обратном включениях и их фазы. Спектры немонотонны с максимумами резонансного типа в интервале (6 ÷ 10.5) ГГц. При этом наибольшие значения  $S_{21}$  характерны для неполяризованных ГП образцов (за исключением ACЭ NaNbO<sub>3</sub>, имеющего рекордное значение  $S_{21}$  (~ 40 дБ) в обычно спечённой керамике), «располагающихся» на фазовой диаграмме в окрестности МО (морфотропная область). В бинарной системе TP состава Na<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>NbO<sub>3</sub>, содержащей фазовые переходы различной природы, максимумы поглощения CBЧ ЭМ (электромагнитная) энергии наблюдаются, как правило, вблизи их границ.

# Магнитные сверхтонкие взаимодействия на ядре $^{51}\mathrm{V}$ в пирохлоре $Lu_2V_2O_7$

<u>Агзамова П.А.</u><sup>1,2\*</sup>, Петров В.П.<sup>2</sup>, Чернышёв В.А.<sup>2</sup>, Никифоров А.Е.<sup>2</sup>, Назипов Д.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: polina agzamova@mail.ru

Среди пирохлоров  $R_2M_2O_7$  (R — редкоземельный ион или Y, M — ион переходного металла) соединение Lu<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>7</sub> является уникальным, т.к. является ферромагнетиком ( $T_C \sim 70$  K) и в то же самое время моттовским диэлектриком. На данный момент вопрос о природе ферромагнетизма в данном соединении остаётся нерешённым.

Во многих оксидах переходных металлов спиновая и орбитальная степени свободы сильно взаимосвязаны, и магнитно упорядоченная структура определяется упорядочением d-орбиталей. Поэтому для того, чтобы понять природу ферромагнетизма в Lu<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, необходимо прояснить образование основного состояния системы и определить орбитальную структуру. Количественным параметром порядка для орбитальной степени свободы является 3d-квадрупольный момент электрона иона переходного металла. Среди экспериментальных методов исследования орбитального состояния  $t_{2g}$ электронных систем метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР) обладает преимуществом в возможности прямого наблюдения каждого орбитального состояния с количественным определением 3d-квадрупольного момента электрона. В пирохлоре Lu<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>7</sub> спектр ЯМР характеризуется магнитным сверхтонким взаимодействием. В данной работе была поставлена задача рассчитать из первых принципов параметры магнитной сверхтонкой связи в пирохлоре Lu<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>7</sub> на ядре <sup>51</sup>V.

Расчёты проводились в программном пакете CRYSTAL09, предназначенном для периодических структур [1]. В качестве основных методов использовались метод неограниченного Хартри–Фока и теория функционала плотности с гибридными функционалами B3LYP и PBE0. Расчёты проводились как для ферромагнитной (ФМ), так и для антиферромагнитной (АФМ) фаз исследуемого пирохлора. Было показано, что наиболее выгодной для Lu<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>7</sub> является ферромагнитная фаза. Параметры магнитной сверхтонкой связи, полученные из *ab initio* расчёта в ФМ фазе, согласуются с экспериментальными данными [2]. Теория функционала плотности оказалась непригодна для описания магнитных свойств на ядрах ионов.

Также был проведён анализ полученных в ходе *ab initio* расчёта данных с целью выяснения, какая орбитальная структура соответствует заданным кристаллической и магнитной. С этой же целью дополнительно был проведён модельный расчёт волновой функции основного состояния  $V^{4+}$  в теории кристаллического поля. Расчётные данные соответствуют картине орбитального упорядочения, полученной экспериментально методом дифракции поляризованных нейтронов [3]. Модельный расчёт 3d-квадрупольного момента электрона иона  $V^{4+}$  с использованием полученной волновой функции основного состояния согласуется с расчётами, представленными в работе [2].

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (код проекта 3.571.2014/К) и поддержана РФФИ (проект № 14–02–00260).

1. http://www.crystal.unito.it

2. Kiyama T., Shiraoka T., Itoh M. et al., Phys. Rev. B 73, 184422 (2006).

3. Ichikawa H., Kano L., Itoh M. et al., J. Phys. Soc. Jap. 74, 1020 (2005).

#### Локализация ионов лития в оксиде Li<sub>2</sub>HfO<sub>3</sub> по данным ЯМР <sup>6,7</sup>Li

Арапова И.Ю.<sup>1</sup>\*, Бузлуков А.Л.<sup>1</sup>, Верховский С.В.<sup>1</sup>, Геращенко А.П.<sup>1</sup>, Михалев К.Н.<sup>1</sup>, Бакланова Я.В.<sup>2</sup>, Денисова Т.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: arapova@imp.uran.ru

Металлаты лития  $Li_2MO_3$  (M = Zr, Ti, Hf) вызывают большой интерес и широко исследуются в настоящее время, поскольку являются перспективными материалами для ядерных реакторов и могут использоваться в качестве подложек люминофорных устройств [1,2]. В отличие от большого числа публикаций, посвященных синтезу и физико–химическим свойствам цирконата и титаната лития, данных по гафнату лития крайне мало. В данной работе методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) <sup>6,7</sup>Li были исследованы два поликристаллических образца Li<sub>2</sub>HfO<sub>3</sub>, полученных методом твердофазного синтеза, с различными температурами отжига (600°С и 1000°С).

Спектры ЯМР <sup>7</sup>Li записаны в широком диапазоне температур  $300 \le T \le 900$  К во внешнем магнитном поле 11.74 Тл. Запись спектров ЯМР <sup>6</sup>Li производилась при комнатной температуре в условиях вращения образца под магическим углом (частота вращения 20 кГц). С одной стороны, поведение лития в соединении  $Li_2HfO_3$  качественно аналогично обнаруженному ранее в  $Li_2ZrO_3$  [3]. Для обоих образцов Li<sub>2</sub>HfO<sub>3</sub> при комнатной температуре мы наблюдали две пары сателлитных линий приблизительно равной интенсивности с разными величинами констант квадрупольного расщепления, соответствующих двум структурным позициям лития (Li1 и Li2) в соседних искаженных кислородных октаэдрах LiO<sub>6</sub>. При высоких температурах эти две линии «сливаются» в одну со средней величиной квадрупольной частоты. Отличительной особенностью соединения Li<sub>2</sub>HfO<sub>3</sub> является наличие третьей дополнительной линии, которая появляется на спектрах ЯМР при  $T \ge 400$  К. Малые значения ширины линии центрального перехода и отсутствие квадрупольной структуры спектра свидетельствует о том, что дополнительная линия обусловлена наличием в системе подвижных ионов лития, причем это движение имеет локальный характер, поскольку параметры других линий стабильны вплоть до высоких температур. В целом, динамика лития в гафнате несколько ниже, чем в цирконате, что обусловлено, по-видимому, более высокой энергией активации для диффузии лития,  $E_{2} \approx 1.2(1)$   $\Rightarrow$ B.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № 01201463330 (проект № 12– М–23–2061).

1. Li M., Qu M., He X., Yu Z., Journal of Power Sources 188, 546 (2009).

2. Burret-Courchesne E., Derenzo S.E., Taylor S.E., U.S. Patent 0148375 (2009).

3. Baklanova Ya.V., Denisova T.A., Arapova I.Yu., Buzlukov A.L. et al., J. Solid State Chem. 208, 43 (2013).

#### Неоднородное магнитное состояние $Sr_{1-x}La_xMnO_3$ : ЯМР <sup>55</sup>Мn

<u>Волкова З.Н.</u><sup>1\*</sup>, Голдырева Е.И.<sup>2</sup>, Михалев К.Н.<sup>1</sup>, Гермов А.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: volkovazn@mail.ru

Манганиты широко изучаются благодаря разнообразию их физических свойств. Однако на сегодняшний день существуют противоречивые данные об основном магнитном состоянии манганитов со слабым электронным допированием, в частности  $Sr_{1-x}La_xMnO_3$  ( $x \le 0.04$ ). Имеются работы, где показано, что в системах на основе  $SrMnO_3$  при уровне допирования 2–4% основное состояние является однородным антиферромагнитным металлом [1], тогда как согласно [2], в данных системах предполагается неоднородное магнитное состояние: в исходной антиферромагнитной матрице формируются ферромагнитные области. Метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР) позволяет получить информацию о локальном распределении магнитных полей в веществе и снять данное противоречие.

В настоящей работе в качестве ядра-зонда для ЯМР исследований выступает <sup>55</sup>Mn. Частота обнаружения ЯМР сигнала в локальном поле ( $H_0 = 0$ ) определяется величиной сверхтонкого взаимодействия ядерного спина марганца с магнитным моментом собственной электронной оболочки. На рис. 1 представлены спектры ЯМР <sup>55</sup>Мп для манганитов  $Sr_{1-x}La_xMnO_3$  (x =0.02, 0.04), записанные при T = 4.2 К. Наличие двух линий в спектре свидетельствует о двух типах ионов марганца с различным магнитным окружением. Основная линия, находящаяся в области частот (250-270) МГц, обусловлена сигналом ЯМР от ионов Mn<sup>4+</sup> антиферромагнитной матрицы, тогда как вторая линия значительно меньшей интенсивности с большим сдвигом в область высоких частот (360-400) МГц связана с сигналом ЯМР от марганца в ферромагнитных проводящих областях [3]. Важно отметить, что



Рис. 1. Спектры ЯМР <sup>55</sup>Мп для манганитов  $Sr_{1-x}La_xMnO_3$  (x = 0.02, 0.04), записанные в локальном поле  $H_0 = 0$  при T = 4.2 К.

интенсивность второй линии возрастает пропорционально концентрации допированных электронов (рис. 1).

Таким образом, на основании данных ЯМР <sup>55</sup>Мп в локальном поле можно сделать однозначный вывод о неоднородном основном магнитном состоянии манганитов  $Sr_{1-x}La_xMnO_3$  (x = 0.02, 0.04), обусловленном электронным допированием. При этом концентрация областей с ферромагнитным упорядочением спинов Mn возрастает пропорционально степени допирования.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № 01201463330 (проект № 12– У-2–1025, № 12–М–23–2061) при поддержке РФФИ (проект № 12–02–00358).

- 1. Sakai H. et al., Phys. Rev. B 82, 180409(R) (2010).
- 2. Chiorescu C. et al., Phys. Rev. B 76, 020404(R) (2007).
- 3. Allodi G. et al., Phys. Rev. B 56, 6036 (1997).

#### ЯМР <sup>17</sup>О в манганитах со слабым электронным допированием

Волкова З.Н.<sup>1</sup>\*, Голдырева Е.И.<sup>2</sup>, Михалев К.Н.<sup>1</sup>, Якубовский А.Ю.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>3</sup>Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, Россия \*e-mail: volkovazn@mail.ru

Методы ядерного магнитного резонанса (ЯМР) являются одними из наиболее эффективных при исследовании зависимости физических свойств манганитов от концентрации допированных носителей заряда. При этом свойства этих соединений могут существенно зависеть от способа допирования. Например, в манганите  $Sr_{0.98}La_{0.02}MnO_3$ , где допирование избыточными электронами обеспечивается за счет гетеровалентного замещения, наблюдается металлическое поведение электросопротивления [1], тогда как в  $SrMnO_{3-\delta}$  ( $\delta = 0.01$ ) с тем же уровнем допирования, но реализованным за счет вакансий в подрешетке кислорода, обнаружено активационное поведение электросопротивления [2].

Эксперименты по ЯМР в манганитах на ядрах <sup>17</sup>О очень информативны, поскольку в перовскитной структуре ионы кислорода расположены в первой координационной сфере магнитных ионов марганца, вследствие чего наиболее «удобны» для исследования локальных особенностей спинового и зарядового распределения.

На рис. 1 приведен пример спектра ЯМР <sup>17</sup>О, записанного для манганита  $Sr_{0.98}La_{0.02}MnO_3$  в парамагнитной области во внешнем магнитном поле  $H_0 = 117.47$  кЭ. Из рисунка видно, что спектр ЯМР определяется главным образом взаимодействием квадрупольного момента ядер кислорода  $e^{17}Q$  с градиентом электрического поля (ГЭП)  $eV_{ii}$  зарядового окружения и состоит из центрального перехода  $(1/2 \leftrightarrow -1/2)$  и двух пар сателлитных переходов  $(\pm 1/2 \leftrightarrow \pm 3/2, \pm 3/2 \leftrightarrow \pm 5/2)$ . Анализ спектра позволил определить компоненты тензора ГЭП: квадрупольную



Рис. 1. Спектр ЯМР <sup>17</sup>О для манганита Sr<sub>0.98</sub>La<sub>0.02</sub>MnO<sub>3</sub>, записанный во внешнем поле  $H_0 = 117.47$  к $\exists$  при T = 300 Ki.

частоту,  $v_Q = 1.05(1)$  МГц, и параметр асимметрии,  $\eta = 0.045(5)$ . Полученные значения практически совпадают с этими величинами для исходного манганита SrMnO<sub>3-δ</sub> ( $\delta = 0.01$ ) с той же концентрацией допированных электронов:  $v_Q = 1.06(1)$  МГц,  $\eta = 0.049(3)$  [3]. Таким образом, на основании данных по ЯМР <sup>17</sup>О можно сказать, что способ легирования не влияет на зарядовое распределение в парамагнитной фазе слабо допированных электронами манганитов.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № 01201463330 (проект № 12– У–2–1025) при поддержке РФФИ (проект № 12–02–00358).

- 1. Sakai H. et al., Phys. Rev. B 82, 180409(R) (2010).
- 2. Chiorescu C. et al., Phys. Rev. B 76, 020404(R) (2007).
- Волкова З.Н., Ядерный магнитный резонанс в слабодопированных манганитах, диссертация на соискание ученой степени к. ф.-м. н. (2013).

## Исследование решеточной динамики в монокристаллах SiC с различным изотопным составом методом ЯМР

Гермов А.Ю.<sup>1\*</sup>, Верховский С.В.<sup>1</sup>, Якубовский А.Ю.<sup>2</sup>, Волкова З.Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, Россия \*e-mail: germov@imp.uran.ru

Карбид кремния (SiC) является полупроводниковым материалом, очень стабильным при внешних воздействиях, что делает его перспективным для применения в микроэлектронике [1]. Данное соединение может существовать в нескольких структурных модификациях, при этом физические свойства SiC сильно зависят от типа кристаллической структуры.

Для изучения влияния динамики решетки на теплопроводность SiC были синтезированы уникальные монокристаллы с различным изотопным составом: образец №1 с естественным содержанием изотопов <sup>28</sup>Si и <sup>29</sup>Si и образец №2, где изотоп <sup>29</sup>Si замещен изотопом <sup>28</sup>Si. В результате теплопроводность образца №2 значительно уменьшилась по сравнению с теплопроводностью исходного образца №1.

Для выяснения причин изменения теплопроводности были записаны спектры ЯМР <sup>13</sup>С монокристаллов и определены времена спин–решеточной релаксации,  $T_1$ , при комнатной температуре. Полученные спектры ЯМР <sup>13</sup>С (рис. 1) при ориентации кристаллографической оси *с* перпендикулярно внешнему магнитному полю  $H_0$  состоят из трех узких линий, соответствующих трем кристаллографически неэквивалентным позициям углерода в гексагональной ре-



Рис. 1. Спектр ЯМР <sup>13</sup>С для образца №1 при ориентации  $c \perp H_0$ .

шетке SiC. Спектры близки по структуре к полученным другими авторами ранее [2]. Значения времен спин–решеточной релаксации для каждой из линий в исследуемых образцах №1 и №2 приведены в Таблице 1.

	Образец №1, мин	Образец №2, мин
Линия 1	$T_1=9.5(4)$	$T_1=5.9(4)$
Линия 2	$T_1=9.5(4)$	$T_1=4.8(3)$
Линия 3	$T_1=42(2)$	$T_1 = 14(2)$

Таблица 1. Время спин–решеточной релаксации,  $T_1$ , для образцов №1 и №2 при T = 300 К.

Уменьшение значений  $T_1$  для всех наблюдаемых линий при изотопном замещении <sup>29</sup>Si  $\rightarrow$  <sup>28</sup>Si, вероятно, связано с изменением фононного спектра вследствие изменения изотопного состава [3], что согласуется с результатами измерения теплопроводности для данных образцов.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № 01201463330 (проект № 12– У–2–1025).

1. Choyke W.J., Devaty R.P., Diamond and Related Materials 6, 1243 (1997).

2. Hartman J.S., Richardson M.F., Sheriff B.L., Winsborrow B.G.J., Am. Chem. Soc. 109, 6059 (1987).

3. Абрагам А., Ядерный магнетизм: Пер. с англ. М.: Иностранная Литература (1963).

# Нелинейные диссипативные моды в цепочках и двумерных решётках металлических наночастиц

<u>Носков Р.Е.</u><sup>1\*</sup>, Смирнова Д.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия <sup>2</sup>Австралийский национальный университет, Эктон, Австралия \*e-mail: nanometa@gmail.com

В настоящей работе рассматриваются нелинейные дискретные моды в двумерной решетке серебряных наночастиц, возбуждаемой оптическим излучением на частоте, близкой к частоте поверхностного плазмонного резонанса уединённой частицы. Предполагается, что размер частиц много меньше оптической длины волны, а межчастичное расстояние достаточно велико, чтобы отклик частиц можно было рассматривать в рамках дипольного приближения. Диэлектрическая проницаемость наночастиц описывается стандартной моделью Друде с нелинейной поправкой Керровского типа.



Рис. 1. Примеры (а) пространственно–временной динамики кинка в цепочке наночастиц и (б) профиля трёх солитонов в двумерной решётке наночастиц.

В силу того, что каждая частица представляет собой резонансно возбуждаемый нелинейный осциллятор с относительно медленным инерционным откликом по сравнению с периодом колебаний света, динамический отклик системы описывается в терминах медленных амплитуд поляризаций каждого шарика. Стандартная процедура линеаризации даёт возможность получить зоны модуляционной неустойчивости и бистабильности однородного стационарного решения соответствующих динамических уравнений на плоскости параметров внешнего поля «интенсивность–частота». Используя эти данные, мы представляем и анализируем примеры генерации плазмонного аналога волн Фарадея, солитонов, осциллонов и кинков (волн переключения), фронт которых представляет собой переход при изменении номера частицы от одного однородного распределения поляризаций частиц к другому при однородном внешнем возбуждении [1–3].

- 1. Noskov R.E., Belov P.A., Kivshar Y.S., Phys. Rev. Lett. 108, 093901 (2012).
- 2. Noskov R.E., Smirnova D.A., Kivshar Y.S., Opt. Lett. 38, 2554 (2013).
- 3. Noskov R.E., Smirnova D.A., Kivshar Y.S., Phil. Trans. R. Soc. A 372, 20140010 (2014).

#### ФАЗИРОВАННАЯ НАНОАНТЕННА С АВТОПЕРЕСТРАИВАЕМОЙ ИНДИКАТРИССОЙ РАССЕЯНИЯ

Носков Р.Е.\*, Лапшина Н.С.

#### Университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия \*e-mail: nanometa@gmail.com

В современной литературе наноантеннами называют устройства для преобразования угловых и частотных характеристик оптического излучения на масштабах, много меньших оптической длины волны. Исследование наноантенн представляет собой быстроразвивающуюся область современной оптики, что обусловлено большим количеством потенциальных приложений, включающих тонкоплёночные солнечные батареи, химические и биологические сенсоры, устройства для сверхбыстрой оптической обработки информации и многие другие [1]. Для практических приложений важным фактором является возможность активного контроля над диаграммой направленности излучения (рассеяния) наноантенны. Однако принцип работы большинства наноантенн основан либо на использовании только одной моды, обеспечивающей лучшую направленность, либо фактор Парселла, либо на квазистационарном переключении между различными модовыми режимами при вариации частоты внешнего поля [2].



Рис. 1. Мгновенные снимки индикатрисы рассеяния в последовательные моменты времени. Один период осцилляций составляет около 30 фс. Цифры обозначают интенсивность в ваттах, отвечающую пику индикатрисы рассеяния для данного момента времени.

В настоящей работе предложена новая концепция активного динамического контроля над направленностью наноантенны, основанная на использовании модуляционной неустойчивости. Показано, что развитие модуляционной неустойчивости в наноантенне, состоящей из двух идентичных нелинейных металлических наночастиц сферической формы, приводит к динамическому обмену энергией между собственными модами нанодимера, который сопровождается периодическим вращением и переключением индикатрисы рассеяния. Такая наноантенна обладает широким сектором сканирования, относительно низким рабочим порогом и коротким временем отклика, что делает её привлекательной для использования в нанофотонных и биологических приложениях [3,4].

- 1. Biagioni P., Huang J., Hecht B., Rep. Prog. Phys. 75, 024402 (2012).
- 2. Shegai T., Chen S., Miljković V., et al., Nature Commun. 2, 481 (2011).
- 3. Lapshina N., Noskov R., Kivshar Y., Opt. Lett. 37, 3921 (2012).
- 4. Лапшина Н.С., Носков Р.Е., Кившарь Ю.С., Письма в ЖЭТФ **96**, 849 (2012).

### Исследование туннельно–связанных двойных ям на основе SiGe/Si методами фотолюминесценции и вертикального транспорта

Бекин Н.А., Жукавин Р.Х., Лобанов Д.Н., Орлов М.Л.\*, Шастин В.Н., Юрасов Д.В., Яблонский А.Н.

Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия \*e-mail: orlovm@ipmras.ru

Одним из направлений развития кремниевой оптоэлектроники является использование внутризонных оптических переходов для создания квантовых каскадных лазеров [1]. Лазеры, использующие межподзонные оптические переходы, созданы на основе соединений *АЗВ*5, однако каскадный лазер на основе кремний–германиевых гетероструктур пока не реализован [2]. Система из двух неэквивалентных туннельно–связанных SiGe квантовых ям может быть представлена как простейший элемент такой конструкции. Для создания активной среды на основе SiGe/Si гетероструктур важным является знание процессов рекомбинации и туннелирования (как резонансного, так и нерезонансного) носителей заряда в таких структурах. Среди эффективных методов исследования данных процессов можно выделить спектроскопию фотолюминесценции с наносекундным временным разрешением [3] и исследование вертикального транспорта при низких температурах.



Wavelength, пт Рис. 1. Спектрокинетические зависимости ФЛ структур с двумя Si<sub>85</sub>Ge<sub>15</sub> квантовыми ямами толщиной 3 и 9 нм. Толщина Si барьера составляла 10 нм. Для серии структур с двумя SiGe квантовыми ямами различной ширины (3 и 9 нм) было проведено исследование спектров ФЛ с наносекундным временным разрешением. Толщина Si барьера между ямами варьировалась от 4 до 50 нм. Было показано, что при толщине барьера, равной или превышающей 10 нм, наблюдается сигнал ФЛ от обеих квантовых ям. В то же время при толщине барьера, меньшей 10 нм, в спектре ФЛ наблюдался сигнал только от широкой квантовой ямы, что, по–видимому, связано с эффективным туннелированием носителей заряда из узкой квантовой ямы в широкую. Таким образом, определена характерная толщина Si барьера, соответствующая возникновению значительного туннелирования носителей заряда между SiGe квантовыми ямами.

Для вертикального транспорта использовались гетероструктуры с параметрами, близкими к исследуемым в фотолюминесценции, но дополнительно имеющие толстые контактные слои для образования хороших омических контактов, что достигалось высоким уровнем легирования. Использовались структуры *p*-типа, что определялось

большим разрывом зон в валентной зоне. Полученные вольтамперные характеристики (ВАХ) позволяют наблюдать зависимость прозрачности структур в зависимости от полярности (в случае несимметричного дизайна или технологически обусловленной несимметричности) и приложенного напряжения, что приводит к последовательности ступенек на ВАХ соответственно прохождению межподзонных резонансов соседних ям.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 12–02–01231, № 14–02–01157.

- 1. Valavanis A., Lever L., Evans C.A. et al., Phys. Rev. B 78, 035420 (2008).
- 2. Sun G., Cheng H.H., Menendez J. et al., Appl. Phys. Lett. 90, 251105 (2007).
- 3. Lenchyshyn L.C., Thewalt M.L.W., Sturm J.C., Xiao X., Phys. Rev. B 47, 16659 (1993).

#### Анализ влияния угла сдвига фаз на колебательные процессы в тонкостенном цилиндре, нагруженном динамическим потоком жидкости

#### Писарев П.В.\*, Модорский В.Я.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия \*e-mail: pisarev85@live.ru

В настоящее время основной тенденцией при проектировании двухступенчатых центробежных насосов является снижение относительной массы. Особенно ярко это наблюдается при создании высокооборотных турбонасосных агрегатов, применяемых в авиационной и космической отраслях, где предъявляются жесткие требования к снижению массы при одновременном увеличении напорных характеристик. При этом улучшение напорных характеристик приводит к повышению нагрузок в рабочем тракте, а при одновременном снижении массы конструкции может происходить и снижение ее жесткости.

Перспективным путем решения этой проблемы является разработка и создание методики по расчету гидроупругих процессов в соединительном канале двухступенчатого центробежного насоса с целью снижения интенсивности динамических нагрузок.

Для решения поставленной задачи была разработана расчетная модель, которая состоит из двух регионов. Жидкостной регион представляет собой проточный тракт модельного двухступенчатого центробежного насоса и учитывает характерные особенности колебательной системы «вход — проточный тракт насоса первой ступени — рабочее колесо первой ступени — соединительный канал — рабочее колесо второй ступени — проточный тракт насоса второй ступени — выход». Твердотельный регион представляет собой тонкостенную цилиндрическую конструкцию.

При описании граничных условий учитывалось, что рабочие колеса насосов первой и второй ступеней жестко закреплены на одном валу, их вращение происходит с заданной частотой и моделируется пульсирующей подачей жидкости в проточный тракт, что можно описать гармоническим законом подачи и отвода жидкости [1]. Угол сдвига фаз  $\varphi$  колебаний на входе относительно колебаний на выходе из соединительного канала определяется взаимным расположением рабочих колес друг относительно друга на валу и не изменяется в процессе работы.

Закон подачи и отвода жидкости задавался в виде:

$$V_n(t) = V + V_A \sin(\omega t + \varphi), \tag{1}$$

где V — номинальная скорость подачи и отвода;  $V_A$  — амплитуда колебания скорости потока;  $\omega$  — угловая частота вращения рабочих колес; t — время расчета;

$$\omega = 2\pi z f_{\rm r},\tag{2}$$

где z — количество лопаток рабочего колеса;  $f_{\rm r} = 142$  Гц — частота вращения ротора.

Анализ полученных результатов показал, что напряжения и перемещения, возникающие в конструкции соединительного канала двухступенчатого центробежного насоса, зависят от номера положения рабочего колеса первой ступени относительно второй (от угла сдвига фаз  $\varphi$ ); максимальные напряжения и перемещения наблюдаются при угле сдвига фаз  $\varphi = \pi$ , минимальные — при угле сдвига фаз  $\varphi = 0$ .

1. Писарев П.В., Арбузов И.А., Ташкинов А.А., Щенятский Д.В., Кириевский Б.Е., Бульбович Р.В., Модорский В.Я., Научно–технический вестник Поволжья **6**, 100 (2012).

#### ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ВИБРАЦИЙ ЛОПАТОК ЦЕНТРОБЕЖНОГО НАСОСА НАГРУЖЕННЫХ ПОТОКОМ ЖИДКОСТИ

#### Писарев Р.В.\*, Писарев П.В.

#### Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия \*e-mail: prvodsto@ro.ru

При разработке центробежных насосов одной из основных является задача по расчету вибраций лопаток рабочих колес. Известно, что вибрации могут приводить к снижению рабочих характеристик и в некоторых случаях — к разрушению элементов конструкции вследствие высокого уровня динамических напряжений, вызванных неравномерностью потока жидкости.

В рамках данной работы проведен численный эксперимент в связанной постановке по определению собственных частот и форм колебаний лопаток рабочего колеса центробежного насоса с использованием многопроцессорного программного комплекса ANSYS, а также исследовалось влияние нагрузки, передаваемой на рабочее колесо центробежного насоса, на собственные частоты и формы колебаний отдельно взятой его лопатки.

При описании граничных условий учитывалось, что рабочее колесо насоса жестко закреплено на валу и его вращение происходит с заданной частотой *f*<sub>r</sub> = 75 Гц.

В качестве нагрузок для конструкционного анализа использовались нагрузки из гидродинамического расчета, импортированные через интерфейс взаимодействия двух сред. В результате численного эксперимента получены поля распределения давления и скоростей, деформации и перемещения лопаток центробежного насоса.

В рамках численного эксперимента был проведен модельный анализ, определены формы и частоты собственных колебаний лопаток при частоте вращения ротора n = 0 и n = 4500 об./мин, нагруженного потоком жидкости. При частоте вращения ротора n = 0 об./мин частоты собственных колебаний лопаток меняются в диапазоне от 557.67 Гц до 8961.7 Гц, а при частоте вращения n = 4500 об./мин изменения частот собственных колебаний лопаток происходят в диапазоне от 583 Гц до 8975 Гц. Форма собственных колебаний лопаток — изгибно–крутильная, лопатки совершают колебательные движения по периодическому закону. Максимальная амплитуда колебаний наблюдается при частоте вращения ротора n = 4500 об./мин и составляет 1.7 мм. Определены напряжения и перемещения лопаток рабочего колеса центробежного насоса. Максимальные значения эквивалентных напряжений выявлены по первой изгибной форме и составляют приблизительно 50 МПа, и по первой крутильной форме — приблизительно 19 МПа.

Полученные результаты по перемещениям и напряжениям, возникающим в лопатках рабочего колеса центробежного насоса, не превышают допустимых значений для данного класса изделий. При повышении частоты вращения ротора наблюдается увеличение амплитуды колебаний давления в проточном тракте и на лопатках рабочего колеса центробежного насоса, что, в свою очередь, приводит к увеличению максимальных напряжений и перемещений возникающих в лопатках. Резонансных эффектов в исследуемом диапазоне частот выявлено не было.

По результатам исследований разработана методика расчета вибраций лопаток рабочего колеса центробежного насоса нагруженного динамическим потоком жидкости в связанной постановке.

1. Писарев П.В., Модорский В.Я., Механика микронеоднородных материалов и разрушение: тезисы докл. VI Всерос. Конф., 41 (2010).

#### Захват в авторезонанс при наличии шума

#### Султанов О.А.

### Институт математики с вычислительным центром Уфимского научного центра РАН, Уфа, Россия e-mail: osa-uf@rambler.ru

В работе исследуется влияние шума на устойчивость авторезонанса в нелинейных колебательных системах.

Под авторезонансом обычно понимается явление значительного роста энергии нелинейных колебаний под действием малой накачки [1]. Такие эффекты можно наблюдать, например, в модели маятника с малой внешней силой:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \sin x = \varepsilon \cos(t - \varepsilon^{4/3} t^2).$$
(1)

Если частота накачки медленно меняется  $0 < \varepsilon \ll 1$ , то в системе случается захват в авторезонанс: энергия достигает величин порядка  $\mathcal{O}(1)$ , см. рис. 1.

Начальный этап захвата в авторезонанс описывается с помощью асимптотического анзатца:

$$x(t) = \varepsilon^{1/3} r(\tau) \cos(t - \varepsilon^{4/3} t^2 + \psi(\tau)) + \mathcal{O}(\varepsilon^{2/3}), \quad \tau = \varepsilon^{2/3} t,$$

где центральную роль играют медленно меняющиеся функции  $r(\tau)$  и  $\psi(\tau)$ , которые удовлетворяют системе модельных уравнений [1]:

$$\frac{dr}{d\tau} = \sin\psi, \quad r\left[\frac{d\psi}{d\tau} - r^2 + \tau\right] = \cos\psi.$$
(2)

С авторезонансом связаны решения системы (2), имеющие растущую амплитуду  $r(\tau) \approx \sqrt{\tau}$  при  $\tau \to \infty$ .

Ставится задача об устойчивости авторезонанса относительно постоянно действующих случайных возмущений [2].

1. Kalyakin L.A., Russ. Math. Surv. 63, 857 (2008).

2. Sultanov O.A., Comp. Math. and Math. Phys. 54, 59 (2014).



Рис. 1. Эволюция энергии колебаний.

# Структурные и механические свойства твёрдых тел

### Получение пленок Ba–Sr–Nb–O (BSN) при помощи разряда с убегающими электронами и их исследование

#### Алиев И.М.

#### Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия e-mail: ialiew@mail.ru



Рис. 1. Рентгенограмма мишени БСН (BSN) (вверху) и типичная рентгенограмма пленки MgO(001) (внизу).

С применением метода, использующего режим разряда с убегающими электронами [1], в атмосфере кислорода при мощности разряда 160 Вт, давлении 66 Па и расстоянии мишень–подложки 12 мм получены Ва– Sr–Nb–O (BSN, или БСН) пленки с использованием керамической мишени  $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Nb_2O_6$  [2] на подложках (001)MgO. Работа представляет собой развитие тонкопленочной технологии на класс соединений со структурой типа вольфрамовой броны. Этот класс соединений перспективен электрооптических приложениях [3].

В работе обсуждаются результаты рентгеновских исследований пленок, являющихся результатом найденных режимов напыления эпитаксиальных пленок. На рисунке 1 представлена структура рентгенограммы мишени и типичная структура полученной BSN/(001)MgO пленки. На рентгенограмме видны основные рефлексы, характеризующие мишень и плен-

ку на подложке (001)MgO. Отсутствие других рефлексов, соответствующих BSN мишени, свидетельствует о строгой ориентации (001) атомных плоскостей BSN пленки относительно атомных плоскостей подложки (001)MgO.

Полученные в работе результаты позволяют сделать вывод о том, что газовый разряд в режиме убегающих электронов с пространственной конфигурацией мишень–подложка (в камере газового разряда) такой, как это было отработано ранее при приготовлении Ba–Sr–Ti–O пленок на (001)MgO [1], может быть использован при получении пленочных Ba–Sr–Nb–O структур.

- 1. Мухортов В.М., Головко Ю.И., Толмачёв Г.Н., Мащенко А.И., Журнал Технической Физики **68**(9), 99 (1998).
- Абубакаров А.Г., Резниченко Л.А., Вербенко И.А., Шилкина Л.А., Толмачев Г.Н., Алихаджиев С.Х., Хасбулатов С.В., Сб–к трудов Второго Международного междисциплинарного молодежного симпозиума «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. (Анализ современного состояния и перспективы развития)» 2, 97 (2013).
- 3. Willmott P.R., Herger R., Patterson B.D., Windiks R., Phys. Rev. B 71, 144114 (2005).

## Свойства и состав наночастиц, полученных при распылении керамических мишеней в плазме емкостного ВЧ разряда

Алихаджиев С.Х.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия e-mail: said366502@mail.ru

Бессвинцовые сегнетоэлектрические материалы титаната бария-стронция (BST) и ниобата бариястронция (BSN) демонстрируют высокие пьезо- и пироэлектрические свойства, проявляют нелинейные оптические эффекты, что дает стимул исследования гетероструктур на основе этих материалов для применения в элементной базе функциональных устройств СВЧ-техники и интегральной оптики. Сегнетоэлектрические пленки высокого структурного совершенства удается получить методом напыления в кислородном емкостном ВЧ разряде. Однако механизмы распыления материала мишеней, его трансформаций в ходе плазмохимических реакций и переноса в разряде и влияние этих процессов на механизмы роста пленок все еще остаются недостаточно изученными. Также на свойства синтезируемых пленок влияют свойства исходных керамических мишеней. При распылении керамической мишени в плазме разряда образуются пылевые частицы [1], которые при определенных условиях накапливаются вблизи катодного блока и оседают на его стенке [2]. Такие пылевые частицы являются промежуточным звеном — предшественником конденсированной фазы синтезируемых пленок, а их структурные свойства — ключом к пониманию механизмов взаимосвязи свойств пленок с параметрами емкостного ВЧ разряда. Целью данной работы являлось сравнительное исследование исходных керамических мишеней и синтезированных в плазме ВЧ-разряда пылевых частиц, а также тонких пленок на подложках MgO. При помощи электронного микроскопа FE-SEM Zeiss SUPRA 25 было установлено, что пылевые частицы имеют преимущественно округлую форму с отсутствием острых краев и плоских граней. Сглаживание отделенных от распыляемой мишени нанофрагментов происходит в результате ударов ускоренных в слое пространственного заряда ионов рабочего газа, а также за счет испарения. Размеры частиц лежат в диапазоне от 14 до 800 нм с преобладанием доли малых значений — 80 нм. Химический состав пылевых частиц определялся методом рентгеноспектрального микроанализа на растровом электронном микроскопе Vega-Tescan с вольфрамовым катодом. Состав измерялся в 12 областях, минимальная область анализа  $\approx 1$  мкм как по площади, так и по глубине. Исследованы неполяризованные спектры комбинационного рассеяния (КР) образцов мишеней, пылевых частиц и тонких пленок BST и BSN. Спектры КР возбуждались при комнатной температуре излучением Ar+ лазера (514.5 нм) и регистрировались рамановским спектрографом Renishaw in Via со спектральным разрешением  $1.5 \text{ см}^{-1}$ .

Полученные результаты показывают, что в разряде происходит не только механическое разрушение мишени, но и сложные плазмохимические реакции. Если частицы, трансформированные в плазме и достигшие подложки в соответствии с нашими представлениями, непосредственно участвуют в синтезе пленки, то роль простых оксидов и других веществ еще предстоит выяснить. Проведенные комплексные исследования позволили получить важную информацию о свойствах наночастиц, образовавшихся в комплексной плазме при распылении керамических мишеней BST и BSN.

1. Зинченко С. П., Толмачёв Г. Н., Прикладная физика 5, 53 (2012).

2. Алихаджиев С.Х., Пляка П.С., Толмачев Г.Н., Успехи прикладной физики 1(6) (2013).
### Структура и свойства массивного MgB<sub>2</sub> после деформации в наковальнях Бриджмена

Акшенцев Ю.Н., Дегтярев М.В., Пилюгин В.П., Криницина Т.П., Кузнецова Е.И., <u>Блинова Ю.В.</u>\*, Сударева С.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: jmll@imp.uran.ru



Рис. 1. Структура образца Mg:B=1.3:2 (СЭМ): в исходном состоянии (а), после деформации поворотом (б).

Ранее [1] установлено, что в результате отжига при 1000°С, 2 ч (давление аргона 0.1 МПа) прессованных таблеток из чешуек магния и порошка металлического бора состава Mg:B=1.3:2 образуется фактически две фракции MgB<sub>2</sub>, сильно отличающиеся по микроструктуре и химическому составу. Одна фракция — очень плотная с микротвердостью ≈ 20 ГПа, с оптимальным содержанием магния и бора и небольшим количеством кислорода. Вторая — рыхлая, кристаллиты MgB<sub>2</sub> плохо связаны между собой, микротвердость не определяется; в ней обнаружены недостаток бора и магния и превышение в 4 раза по сравнению с плотной фракцией содержания кислорода. Размеры областей, занятых этими фракциями, — 100–500

мкм; чередуясь, они заполняют все пространство образца. Критическая плотность тока образца  $\approx 5 \times 10^4 \, \text{A} \cdot \text{сm}^{-2}$  обеспечивается объемной сеткой из плотных областей фазы MgB<sub>2</sub>.

Задачей настоящего исследования было увеличение объемной доли плотной фракции MgB<sub>2</sub>, плотности образца в целом и критической плотности тока с помощью сильного деформационного воздействия на синтезированный массивный образец. Был выбран образец, приготовленный из чешуек магния чистотой 99.98% и порошка металлического бора, полученного плавкой аморфного бора чистотой 96.93%, содержащий помимо MgB<sub>2</sub> некоторое избыточное количество магния (Mg:B=1.3:2, чтобы установить, не происходят ли во время сильного деформационного воздействия какие-либо фазовые превращения или образование дополнительных фаз). Исследованы два состояния этого образца: исходное (предварительное прессование в пресс-форме смеси исходных материалов, последующие отжиги при 400°С (в вакууме) + 600°С, 2 ч (в аргоне, 0.2 МПа) + 900°С, 1 ч (в аргоне, 0.2 МПа)) и после последующей деформации прессованием со сдвигом в наковальнях Бриджмена (*P* = 1.5 ГПа, поворот 20°). По рентгенографическим данным, каких–либо фазовых превращений или образования новых фаз в результате деформации в наковальнях Бриджмена не происходит — количественно фазовый состав практически не изменяется: 55% MgB<sub>2</sub>, 15% Mg, 29% Mg<sub>2</sub>B<sub>25</sub>, 1% MgO. Однако радикально изменяется состоящая из двух фракций структура исходного образца (рис. 1): по данным сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), поверхность шлифа после деформации поворотом становится гладкой и плотной, отдельные зерна не выявляются, т.е. связь между зернами значительно увеличивается. Микротвердость образца в целом увеличивается, исчезают рыхлые участки. Критическая плотность тока  $\approx 0.2 \times 10^5 \,\mathrm{A \cdot cm^{-2}}$ .

1. Кузнецова Е.И., Сударева С.В., Криницина Т.П. и др., ФММ 115, 186 (2014).

# Структурные изменения в поликристаллическом магнии после мегапластической деформации (сдвиг под давлением)

<u>Власова А.М.<sup>1,2\*</sup>, Гринберг Б.А.<sup>1</sup>, Пилюгин В.П.<sup>1</sup></u>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: alisa@imp.uran.ru

Различные способы интенсивной пластической деформации: сдвиг под давлением, равноканальное угловое прессование и гидроэкструзия демонстрируют возможность получения ультрамелкозернистых и наноструктурных металлических материалов. На сегодняшний день автомобильная и аэрокосмическая промышленности требуют легких материалов, тогда как магний и его сплавы удовлетворяют этим требованиям, позволяя посредством замены некоторых элементов конструкций на магниевые снижать вес всей конструкции. Особенность магния как металлического материала заключается в том, что для него характерны аномалии деформационного поведения: аномалия предела текучести и блокировка дислокаций без помощи внешних напряжений [1,2].

Образцы поликристаллического магния в форме дисков диаметром 5 мм и толщиной  $h_0 = 0.2...0.3$  мм деформировали кручением под давлением  $P \approx 6$  МПа при комнатной температуре до различных степеней деформации. Цель данной работы заключается в исследовании эволюции структуры чистого металлического магния после мегапластической деформации. Изгибные контуры экстинкции иллюстрируют наличие большого уровня внутренних напряжений. Муар, отчетливо видный на границе зерен, может быть связан с наличием слаборазориентированных относительно кристаллографической **с**-оси зерен с базисной ориентировкой, либо фрагментов (рис. 1а). При увеличении деформации до e = 11 доля большеугловых границ возрастает, средний размер зерна составляет 277 нм (рис. 16). Характерно образование базисной текстуры во время деформации.



Рис. 1. Электронно–микроскопические изображения структуры Mg после кручения и соответствующие им электронограммы: a) e = 6, б) e = 11.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-02-00015).

- 1. Власова А.М., Гринберг Б.А., Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**(1), 105 (2014).
- 2. Власова А.М., Гринберг Б.А., Иванов М.А. и др., Деформация и разрушение материалов 4, 10 (2014).

### Оптимальные режимы деформации и облучения молибдена для получения однородной субмикрокристаллической структуры

<u>Гапонцева Т.М.</u><sup>1\*</sup>, Махинько Ф.Ф.<sup>2</sup>, Чащухина Т.И.<sup>1</sup>, Воронова Л.М.<sup>1</sup>, Гущина Н.В.<sup>2</sup>, Пилюгин В.П.<sup>1</sup>, Овчинников В.В.<sup>2</sup>, Дегтярев М.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: tmt @mail.ru

Известно, что материалы с нанокристаллической структурой отличаются улучшенными физическими, химическими, механическими и другими свойствами. Для получения таких материалов часто используют комплексные обработки, сочетающие деформацию и последующий отжиг. Отжиг решает задачу превращения неравновесной деформационной нано– и субмикрокристаллической (СМК) структуры в более стабильную субмикрозернистую рекристаллизованную структуру, при этом дисперсность структуры теряется. Наиболее перспективным методом отжига представляется радиационный, способствующий прохождению рекристаллизации при более низких температурах и за рекордно короткое время по сравнению с печным отжигом.

Цель работы — подобрать оптимальные режимы деформации и ионно–лучевой обработки, позволяющие получить в молибдене наиболее однородную и дисперсную субмикрозернистую структуру. Для получения ультрадисперсной структуры деформацию проводили при температуре 290 К методом НРТ. Образцы облучали на ионном имплантере ИЛМ–1 с источником ПУЛЬСАР–1М пучком ускоренных ионов Ar<sup>+</sup>. Структуру исследовали методами просвечивающей (ПЭМ) и сканирующей (СЭМ) электронной микроскопии на расстоянии 1.5 мм от центра образца. Размеры элементов структуры определяли на светлопольных и темнопольных изображениях.

Анализ полученных зависимостей структурных превращений и механических свойств от параметров деформации и облучения молибдена позволил найти оптимальный режим обработки, позволяющий сформировать однородную субмикрозернистую структуру.

Одним из критериев выбора оптимального режима радиационной обработки молибдена, с нашей точки зрения, является коэффициент вариации линейных размеров зерен k, поскольку он характеризует однородность структуры. Коэффициент вариации определяется из распределений элементов структуры по размерам по формуле  $k = \sigma/d_{av}$ , где  $\sigma$  — среднеквадратичное отклонение размера элементов структуры,  $d_{av}$  — средний размер элементов структуры. Если значение k близко к 0.5, то структура в этом случае считается однородной, а когда в материале наблюдают аномальный рост зерна — значение k близко к 1. Чем меньше коэффициент вариации, тем выше однородность структуры по размерам. В нашем случае после деформации  $k_{\rm def} = 0.75$ , т.е. структура не содержит зародышей вторичной рекристаллизацией, но и не является достаточно однородной. Облучение без выдержки при 1073 К значительно повышает однородность деформированной структуры ( $k_{1073} = 0.43$ ), а выдержка в течение 9 мин снижает значение коэффициента до  $k_{opt} = 0.38$ . Увеличение выдержки облучения при этой температуре до 18 мин приводит к вырыванию материала с поверхности образца и, таким образом, к разрушению материала. При радиационном отжиге при 1173 К в течение 9 мин наблюдается аномальный рост зерна в материале. Поэтому оптимальным режимом мы считаем деформации со степенью e = 6.5 при 290 К и последующее облучение, обеспечивающее нагрев до 1073 К, с выдержкой 9 мин, который позволил получить однородную субмикрозернистую структуру со средним размером зерна менее 0.5 мкм.

Работа выполнена по теме «Импульс» и при частичной финансовой поддержке программы Президиума РАН № 24 (проект № 12–П–2–1061) и программы УрО РАН (проект № 12–У–2–1017).

### Особенности структуры атомноупорядочивающегося сплава Cu<sub>3</sub>Pd, образовавшейся в результате деформационно–термического воздействия

Гохфельд Н.В.\*, Буйнова Л.Н., Пилюгин В.П., Пушин В.Г.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: gokhnv@gmail.com



Рис. 1. Доменная микроструктура сплава после МПД при криогенной температуре и последующим отжиге при 450°С длительностью 1ч и соответствующая электронограмма.

Одним из способов повышения эффективности деформационной обработки является деформация при криогенных температурах. Предполагается, что понижение температуры деформации должно подавить процессы динамического возврата и рекристаллизации, тем самым сохранив высокую плотность дислокаций, и активизировать механическое двойникование как механизм дополнительной пластической деформации. В работе [1] было показано, что после мегапластической деформации (МПД) [2] методом кручения под высоким гидростатическим давлением (КВД) при комнатной температуре в сплаве Cu<sub>3</sub>Pd при последующей термической обработке существенно ускоряется кинетика упорядочения. Методами просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии, рентгенодифрактометрии, резистометрии и дюрометрии изучены микроструктура, механические и физические свойства атомноупорядочивающегося сплава Cu<sub>3</sub>Pd, подвергнутого МПД при криогенной температуре и последующим отжигам. Данный вид

деформационно-термического воздействия позволил получить атомноупорядоченное состояние, при этом не увеличив в значительной степени размер зерна (рис. 1) и сохранив электросопротивление на низком уровне. В результате предварительной криогенной МПД удалось ускорить кинетику упорядочения, что согласуется с результатами, изложенными в работе [3], где деформация проводилась при комнатной температуре. Кроме того, установлено влияние степени деформации и температуры последующих изотермических изохронных отжигов на кинетику и степень упорядочения, построены гистограммы распределения размера зерна.

Работа выполнена при частичном финансировании программы интеграционных исследований УрО РАН № 12–И–2–2031.

- 1. Буйнова Л.Н., Гохфельд Н.В., Коуров Н.И., Пилюгин В.П., Пушин В.Г., Деформация и разрушение материалов **10**, 24 (2009).
- 2. Глезер А.М., Известия РАН. Сер. Физ. 71, 1764 (2007).
- 3. Буйнова Л.Н., Гохфельд Н.В., Коуров Н.И., Пилюгин В.П., Пушин В.Г., Деформация и разрушение материалов **10**, 40 (2013).

# Изменение магнитных свойств сплавов на основе Ni<sub>3</sub>Al после деформации

Давыдов Д.И.

#### Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: davidov@imp.uran.ru

Интерметаллическое соединение  $Ni_3Al$  со сверхструктурой типа  $L1_2$  является основной упрочняющей фазой жаропрочных никелевых сплавов, представляющих важную группу высокопрочных материалов. Эти сплавы применяются для изготовления турбинных лопаток, ответственных и наиболее нагруженных деталей авиационных и стационарных газотурбинных установок.

Для ряда интерметаллических соединений характерно изменение магнитного состояния при деформации. Характерной чертой таких интерметаллидов является то, что ферромагнитные элементы в упорядоченной структуре сильно изолированы друг от друга атомами неферромагнитных элементов[1]. При увеличении степени деформации эффект возрастает, так как увеличивается степень разупорядочения в структуре, при этом атомы ферромагнитных элементов сближаются и могут взаимодействовать друг с другом.

Деформация может привести как к росту, так и к уменьшению значений магнитной восприимчивости сплавов на основе Ni<sub>3</sub>Al [2]. Различие в поведении сплавов объясняется различной структурой сплавов, возникающей в результате деформации.

В данной работе рассмотрено влияние различных видов деформации на магнитные свойства сплавов на основе интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al для выяснения связи структурного состояния сплава с характером изменения его магнитной восприимчивости. Влияние деформации на магнитные свойства неоднозначно. Интенсивная пластическая деформация (ИПД) кручением под давлением приводит к значительному понижению магнитной восприимчивости. После холодной прокатки (40%) магнитная восприимчивость уменьшается. После испытаний на растяжение, проведенных при температуре 880°С, магнитная восприимчивость возрастает.

Различие в поведении магнитных свойств объясняется различным характером структуры сплава после деформации. Происходящее при ИПД образование нанокристаллической структуры (размер зерен в среднем 20 нм) сопровождается появлением многочисленных дефектов внутри кристаллитов, большого числа границ и, соответственно, приграничных искаженных объемов. Результатом является падение степени дальнего порядка в сплаве в целом. Этот процесс сопровождается понижением магнитной восприимчивости интерметаллида.

При высокотемпературной деформации вблизи зоны разрушения были видны полосы деформации, внутри которых повышена плотность дефектов. Можно видеть большое количество пересекающихся дефектов упаковки. В месте их пересечения возникает объемный комплекс дефектов, представляющий собой область с повышенной концентрацией атомов никеля и нарушенным дальним порядком. Такой комплекс дефектов, локально образовавшийся в сплаве с высокой степенью дальнего порядка, выступает в качестве ферромагнитного кластера в парамагнитной матрице.

Работа выполнена при поддержки гранта РФФИ № 14-03-31499.

1. Zeng Q., Baker I., Intermetallics 15, 419 (2007).

2. Baker I., Wu D., TSM letters 2, 57 (2005).

# Исследование формирования тонкой структуры модельных сталей во время механического сплавления и при отжигах

Елькин И.А.\*, Волков В.А., Чулкина А.А.

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия \*e-mail: ivan.a.elkin@gmail.com

Методами рентгеновской дифракции исследовалась тонкая структура нанокристаллических порошковых модельных сталей на основе Fe — 4.5 ат.% (1 масс.%) С, легированных Si и Cr, полученных механосплавлением (MC) в шаровой планетарной мельнице Fritsch Pulverisette 7.

После механосплавления исследуемые порошки представляют собой нанозеренный феррит с приграничными прослойками аморфной фазы на основе железа и углерода. Рассматриваемые материалы являются хорошими модельными объектами, поскольку позволяют отслеживать закономерности формирования наноструктурного состояния при их получении и дальнейшую эволюцию этого состояния при отжигах.

В работе показано, что традиционные методы, такие как метод Вильямсона–Холла (основанный на зависимости уширении дифракционных линий от величины дифракционного вектора), не подходят для определения параметров структуры исследованных сплавов. Экспериментальные точки имеют сильный разброс и не могут быть аппроксимированы прямой линией, как того требует метод. Наблюдаемый разброс связан с влиянием анизотропии упругих свойств кристаллов (контраст–фактор). В настоящее время разработаны гораздо более адекватные и информативные методы определения характеристик тонкой структуры поликристаллических материалов.

При помощи современного метода CMWP [1,2] (Convolutional Multiple Whole Profile fitting method), примененного для анализа рентгенограмм, определены средние размеры блоков когерентного рассеяния и их распределения по размерам (в приближении логнормального распределения), а также плотности дислокаций и их характеристики.

Показано, что объемно–взвешенные размеры кристаллитов для механосплавленных порошков близки в исходном состоянии (3–4 нм) и монотонно увеличиваются по мере повышения температуры отжига до размеров порядка 60 нм. Однако увеличение размеров происходит с различной скоростью в зависимости от легирования.

Определено, что мат. ожидания и среднеквадратические отклонения логнормального распределения блоков когерентного рассеяния сплавов после MC имеют разную зависимость от температуры отжига.

Показано, что после MC сплавы характеризуются очень высокой плотностью дислокаций, вплоть до  $10^{13}$  см<sup>-2</sup>.

Начало интенсивного роста кристаллитов феррита и достижение минимальных значений плотности дислокаций во всех сплавах совпадает с началом образования цементита.

Работа выполнена при финансовой поддержке проектов УрО РАН №№ 12–У–2–1035, 14–2–НП–32 и проекта РФФИ № 14–03–00044.

1. Ribarik G., Ungar T., Gubicza J., J. Appl. Cryst. 34, 669 (2001).

2. Ribarik G., Gubicza J., Ungar T., Mat. Sci. Eng. 387, 343 (2004).

### К вопросу об измерении микротвердости покрытий методом индентирования

#### Кайгородов А.С.\*, Мамаев А.С.

#### Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: kaigor@iep.uran.ru

В настоящее время наиболее популярным методом измерения механических свойств твердых тел является метод индентирования. Относительная простота пробоподготовки и проведение измерения (твердости, приведенного модуля упругости, ползучести, трещино–, износо– и термостойкости) позволяют позиционировать данный подход как экспресс–метод определения важнейших механических свойств материалов. Однако при измерении (тонких) покрытий возникают определенные трудности ввиду аддитивности измеряемой физической величины в системе «покрытие–подложка».

В связи с этим настоящая работа посвящена обзору параметров/особенностей метода индентирования, накладывающих ограничения на корректное измерение микротвердости покрытий.

В частности, обсуждается влияние шероховатости поверхности на упруго–пластические характеристики твердого тела. На примере меди показано, что увеличение шероховатости с 5 до 167 нм приводит к увеличению ошибки измерения микротвердости (при вдавливании алмазной пирамидки (индентора) на глубину порядка 500 нм) примерно в 30 раз.

Рассматривается размерный эффект индентирования, заключающийся в увеличении значения микротвердости материала при уменьшении глубины вдавливания индентора. Приводятся причины появления данного эффекта.

Экспериментально определяется максимальная глубина вдавливания индентора, исключающая влияния подложки на твердость покрытия. Для этого в работе использовались покрытия TiC на подложках из карбида вольфрама (≈ HV 1700) и из нержавеющей стали (≈ HV 200). Покрытия наносились методом магнетронного напыления титановой и графитовой мишеней (ИЭФ УрО РАН) [1]. Изучались покрытия толщиной от 100 до 2300 нм. Установлено, что при вдавливании пирамидки на глубину порядка 10% от толщины покрытия и менее влияние подложки на измеряемую величину микротвердости пренебрежимо мало. Это соответствует существующим на данный момент теоретическим расчетам. Изучено влияние скорости деформации покрытия TiC, нанесенного на подложки с резко отличающимися механическими свойствами, на его микротвердость.

1. Гаврилов Н.В., Мамаев А.С., Кайгородов А.С., Письма в ЖЭТФ 35, 69, (2009).

#### Кристаллическая структура фульмината серебра

<u>Ковалев Е.В.</u>\*, Кравченко Н.Г., Поплавной А.С.

#### Кемеровский государственный университет, Кемерово, Россия \*e-mail: evgeny\_1991@mail.ru

Фульминат серебра (AgCNO) является инициирующим взрывчатым веществом, его кристаллическая структура впервые экспериментально определена в работе [1]. Было обнаружено, что он существует в двух полиморфных формах — ромбоэдрической AgCNO(I) (Z = 6) и орторомбической AgCNO(II) (Z = 4), обе формируются при комнатной температуре. В настоящее время существует еще несколько экспериментальных работ по уточнению его геометрических параметров, однако детальных исследований его электронной структуры нет.

Нами были проведены теоретические исследования геометрических характеристик обеих кристаллических фаз. Расчет проводился в рамках теории функционала электронной плотности программным кодом CRYSTAL09 [2,3] с использованием базиса контрактированных гауссовых орбиталей TZVP [4]. Во избежание сильного занижения ширины запрещенной зоны использовался гибридный обменно-корреляционных потенциал B3LYP, который дополнительно включает обменную составляющую в рамках теории Хартри–Фока. Вычисленные равновесные геометрические параметры равны: для AgCNO(I): a = 9.2481 Å,  $\alpha = 115.79^{\circ}$  (a = 9.087(3) Å,  $\alpha = 115.73^{\circ}$  [5], эксп.); для AgCNO(II): a = 3.8135 Å, b = 10.6479 Å, c = 5.9911 Å(a = 3.880(2) Å, b = 10.752(5) Å, c = 5.804(2) Å [6], эксп.). Полученные нами результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными значениями, относительная погрешность не превышает 3% и максимальна для постоянной решетки с в AgCNO(II). = -10733.96140 Ha, что в пересчете на одну формульную единицу дает:  $E_t(AgCNO(I)) = -5366.97254$  Ha и  $E_t(AgCNO(II)) = -5366.9807$  Ha (в последнем случае кристаллографическая решетка является базоцентрированной и элементарная ячейка содержит две формульные единицы). Отсюда следует, что кристаллическая фаза AgCNO(II) является несколько более предпочтительной.

Были также вычислены заряды на атомах по схеме Малликена. Для AgCNO(I) и AgCNO(II) на атомах серебра заряды равны соответственно 0.808|e| и 0.874|e|. На атомах углерода, азота и кислорода заряды отрицательные и равны для AgCNO(I): z(C) = 0.306e, z(N) = 0.173e, z(O) = 0.328e; для AgCNO(I): z(C) = 0.269e, z(N) = 0.178e, z(O) = 0.427e. Полученное распределение зарядов внутри фульминатиона принципиально отличается от изомерного ему цианат-иона NCO, где крайние атомы азота и кислорода приобретают избыточные отрицательные заряды, равные 0.819e и 0.734e, а атом углерода — положительный 0.612|e|.

Вычисления зонной структуры и карт распределения электронной плотности были проведены для оптимизированных структурных параметров. Получено, что оба кристалла являются непрямозонными. В AgCNO(I) вершина валентной зоны реализуется в точке Z(1/2, 1/2, 1/2), дно зоны проводимости — в точке  $\Gamma$ , во второй кристаллической фазе — соответственно в S(100) и Z(001). Ширины валентной и запрещенной зон равны 23.78, 5.02 эВ и 23.89, 4.24 эВ соответственно для первой и второй кристаллических фаз.

- 1. Britton D., Dunitz J.D. Acta Cryst. 19, 662 (1965).
- 2. Dovesi, R. et al., CRYSTAL09 Users' Manual, University of Torino, Torino (2010).
- 3. Dovesi, R. et al., Zeit. Kristallogr. 220, 571 (2005).
- 4. Peintinger M.F. et al., J. Comput. Chem. 34, 451 (2013).
- 5. Britton D., Acta Cryst. C47, 2646 (1991).
- 6. Barrick J.C., Canfield T.D., Giessen B.C., Acta Cryst. B35, 464 (1979).

### Анализ болида над Кольским полуостровом 19 апреля 2014 года и поиск его фрагментов

Кругликов Н.А.<sup>1,2</sup>\*, Грицевич М.<sup>1,3,4</sup>, Гроховский В.И.<sup>1</sup>, Когоут Т.<sup>3,5,6</sup>, Халода Дж.<sup>7</sup>, Лейтинен Е.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия
<sup>3</sup>Финская группа по наблюдению болидов, Хельсинки, Финляндия
<sup>4</sup>Финский геодезический институт, Хельсинки, Финляндия
<sup>5</sup>Университет Хельсинки, Хельсинки, Финляндия
<sup>6</sup>Институт геологии АН ЧР, Прага, Чешская республика
<sup>7</sup>Чешская геологическая служба, Прага, Чешская республика
\*e-mail: nick@imp.uran.ru

В настоящей работе представлены результаты по реконструкции траектории, моделированию невидимой части полета и определению предударной орбиты яркого болида, который появился в ночном небе над Кольским полуостровом недалеко от границы с Финляндией 19 апреля 2014 года. Появление болида было зарегистрировано в Финляндии с трех точек: Куусамо, Микклели и Мухос, принадлежащих финской группе по наблюдению болидов. Кроме того, доступно видео снятое А. Нестеровым в Снежногорске (Россия) с противоположной стороны трека болида. Видео было тщательно откалибровано и принято в расчет при реконструкции трека. Болид достиг как минимум -18 звездной величины во время его пиковой яркости. О его наблюдениях есть много свидетельств очевидцев с территорий Финляндии, России и Норвегии.

Анализ торможения показал, что масса метеороида перед вхождением в атмосферу Земли составляла около 500 кг. Далее, опираясь на анализ наблюдения болида [1], было предсказано, что часть метеороида уцелела после вхождения в атмосферу и достигла земли. Полученные физические параметры, ответственные за распыление и скорость потери массы болида в атмосфере, соответствовали критерию возникновения метеорита, описанном в [2]. Было решено провести детальные расчеты невидимой части полета для оставшихся фрагментов с учетом ветра и организовать экспедицию по поиску метеорита в расчетной области приземления. Пятидневная экспедиция, в состав которой входили 4 участника из России и Финляндии, состоялась в конце мая сразу после таяния снега и до начала роста травы. 29 мая 2014 года первый фрагмент весом 120.35 г был найден на лесной дороге в пределах предсказанной зоны падения. Второй фрагмент метеорита весом 47.54 г, полностью покрытый корой плавления, был обнаружен неподалеку на следующий день.

Минералогический и физический анализ основной массы вещества был выполнен Чешской геологической службой и в университете Хельсинки соответственно с использованием методов и инструментов, описанных в [3]. Метеорит был классифицирован как обыкновенный хондрит класса H5 (S2, W0). Средняя плотность 3.5 г/см<sup>3</sup>, зеренная плотность 3.8 г/см<sup>3</sup>, пористость составила 5%. Логарифм магнитной восприимчивости (в 10<sup>-9</sup> А/кг) 5.4.

Экспедиция и лабораторные исследования были поддержаны Академией наук Финляндии и Уральским федеральным университетом.

1. Lyytinen E., Gritsevich M., Proceedings of the International Meteor Conference 2012, 155-167 (2013).

2. Gritsevich M. et al., Cosmic Research 50, 56 (2012).

3. Kohout T. et al., Icarus 228, 78 (2014).

# Структура и свойства никеля, наноструктурированного интенсивной пластической деформацией

Кузнецов Д.Д. $^{1*}$ , Столбовский А.В. $^1$ , Попов В.В. $^1$ , Попова Е.Н. $^1$ , Пилюгин В.П. $^1$ , Рачёва Е.А. $^2$ 

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: kuznetsovdd@imp.uran.ru

Поскольку большинство исследований никеля после интенсивной пластической деформации (ИПД) проводились на материалах разной чистоты, необходимо было изучить возможность наноструктурирования никеля различными способами ИПД и провести анализ термической стабильности полученных структур на одном и том же материале. Исходным материалом для исследования был выбран поликристаллический Ni с чистотой 99.6% и средним размером зёрен около 200 мкм.

Использовались такие методы ИПД, как КВД (кручение под высоким давлением) при комнатной и криогенной температурах, давление составляло 6 ГПа, 5 оборотов РКУП (равноканальное угловое прессование), режим ВС4 и ДКУП (динамическое канально–угловое прессование), скорость деформации 10<sup>3</sup>–10<sup>5</sup> с<sup>-1</sup>.

При КВД в жидком азоте формируется нанокристаллическая структура со средним размером кристаллитов 80 нм (размер кристаллитов оценивался по снимкам электронной микроскопии программой Siams) и микротвёрдостью 6200 МПа, которая недостижима деформацией КВД при комнатной температуре [1]. Установлено, что структура после ДКУП и РКУП менее дисперсная и имеет меньшую микротвердость, чем после КВД при пониженных температурах [2].

Термическая стабильность Ni, наноструктурированного КВД в жидком азоте, очень низка. Рекристаллизация начинается с 300°C, в то время как после КВД при комнатной температуре рекристаллизация наблюдается при 400°C, а для РКУП и ДКУП — при 500°C [3].

Низкая термическая стабильность структуры, полученной КВД, особенно при криогенной температуре, в сравнении с таковой после РКУП и ДКУП, обусловлена повышенными высокими внутренними напряжениями и накопленной внутренней энергией.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № 01201463330 при поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 12–П–2–1016) и молодёжного проекта УрО РАН № 14–2–НП–265.

- 1. Popov V.V., Popova E.N., Kuznetsov D.D., Stolbovskii A.V., Pilyugin V.P. Fizika Metallov i Metallovedenie **115**, 727 (2014).
- 2. Popov V.V., Popova E.N., Kuznetsov D.D., Stolbovsky A.V., Shorohov E.V., Nasonov P.A., Gaan K.A., Reglitz G., Divinski S.V., Wilde G., Materials Science & Engineering A **585**, 281 (2013).
- 3. Popov V.V., Popova E.N., Kuznetsov D.D., Stolbovsky A.V., Shorohov E.V., Def. Diff. Forum 354, 109 (2014).

# Влияние режимов термомеханической обработки на текстуру и магнитострикцию сплава Fe<sub>86</sub>Ga<sub>14</sub>

<u>Милютин В.А.</u>\*, Гервасьева И.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: v.a.milutin@gmail.com

Целью работы является изучение зависимости текстуры и магнитных свойств сплава  $Fe_{86}Ga_{14}$  от степени деформации при холодной прокатке, а также от времени и температуры отжига. Авторы работы [1] показали, что магнитострикция ( $\lambda_{100}$ ) увеличивается с повышением объемной доли зерен <100> на поверхности образца на примере сплава  $Fe_{81}Ga_{19}$ . Однако заведомо известно, что при составе  $Fe_{86}Ga_{14}$  магнитострикция значительно ниже [2], но тем не менее подобные тенденции при изменении магнитострикции в зависимости от текстуры сохраняются. Из 9 образцов, подвергнутых различным режимам термомеханической обработки, было выбрано 3 с наиболее высокой объемной долей на их поверхности зерен с кристаллографическими плоскостями {100} и {110}, содержащими направление легкого намагничивания <100>. Необходимо отметить, что в образце №3 после данной обработки выросло крупное зерно с отклонением от плоскости {110} более 10°, но менее 15°.

Анализ текстуры рекристаллизации полученных образцов осуществлялся с помощью метода дифракции обратно отражённых электронов на сканирующем электронном микроскопе. Магнитострикция измерялась с помощью и тензодатчиков, и сопутствующего оборудования. В таблице 1 приведены полученные данные по всем трём образцам.

1 71	1 1	
Образец	$({100}+{110})\pm 10^\circ, \%$	$\lambda \cdot 10^{-6}$
№1 (прокатка до 0.53 мм, отжиг 900°С, 15 мин)	23.4	46.8
№2 (прокатка до 0.92 мм, отжиг 800°С, 15 мин)	16.8	41.2
№3 (двукратная прокатка до 0.30 мм,	8.7	36.1
отжиг 900°С, 15 мин)	37.1 (±15°)	

Таблица 1. Магнитнитострикция и текстурные компоненты после различных режимов обработки.

Изучение разных способов получения листовых образцов из сплава Fe<sub>86</sub>Ga<sub>14</sub> показало, что наибольшее количество ориентировок, содержащих направление легкого намагничивания <001>, получается в образце, подвергнутом после горячей прокатки однократной холодной прокатке и отжигу при 900°С в течение 30 минут. Невысокие значения магнитострикции насыщения в сплаве Fe<sub>86</sub>Ga<sub>14</sub> связаны с низким содержанием галлия в сплаве. Тем не менее, наибольшее значение получилось в сплаве №1 с высокой объемной долей ориентировок, содержащих направление легкого намагничивания в текстуре поликристаллического образца. Эта работа является заделом для дальнейшего исследования развития текстуры Fe–Ga сплавов и её влияния на магнитные свойства.

Работа выполнена при поддержке проекта УрО РАН №14–2–НП–8.

1. Na S.-M., Flatau A.B., Scripta Materialia 66, 307-310 (2012).

2. Xing Q., Lograsso T.A., Scripta Materialia 65, 359–362 (2011).

### Концентрационные неоднородности в прутках титановых сплавов, выявленные с помощью сертификационной процедуры «голубого травления»

Выходец В.Б., Курённых Т.Е., Обухов С.И.\*

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: obuhovsvii@imp.uran.ru

В течение длительного времени для контроля качества полуфабрикатов из титановых сплавов используется сертификационная процедура «голубого травления». При этом выявляются структурные неоднородности в виде светлых и тёмных пятен на голубом фоне. Наличие таких неоднородностей является основанием для браковки полуфабрикатов и отправки в переплав. В работе ставилась задача по идентификации природы пятен, изучению особенностей химического состава зон образцов, в которых сформировались пятна, установлению причин неудовлетворительных механических свойств отбракованных полуфабрикатов. Образцы для исследований с пятнами и без пятен поставлялись ОАО «Корпорация ВСМПО-АВИСМА». Все они вырезались из прутков сплава Ті-6Аl-4V, подвергнутых на предприятии сертификационной процедуре «голубого травления» в рамках реального производственного цикла. Проводились сравнительные исследования распределений атомов кислорода и азота в зонах образцов, контактирующих и не контактирующих с пятнами. Измерения концентрации кислорода и азота проводились с помощью методики ядерного микроанализа, при этом использовался пучок диаметром 0.2 мм. Получена репрезентативная база данных по концентрации кислорода и азота в зонах образцов, контактирующих и не контактирующих с пятнами. Наблюдались достоверные отличия в «кислородных» участках спектров, полученных при съёмках в зоне пятна и на бездефектном участке плёнки. Средняя концентрация кислорода в зоне образца, контактирующей с пятнами, была в 2-3 раза выше, чем в матрице сплава (рис. 1).



Рис. 1. Спектр ядерной реакции  ${}^{16}O(d, p_1){}^{17}$  от образца, подвергнутого «голубому травлению», а — в зоне пятна, b — на бездефектном участке.

По результатам исследования, появление пятен при «голубом травлении» и образование газосодержащих дефектов металлургического происхождения имеют общий генезис, обусловленный геттерными свойствами титана.

## Методика измерений акустических свойств наноматериалов

Перевозчикова Ю.А.\*, Бунтов Е.А., Зацепин А.Ф.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: j-perevozchikova@mail.ru

В настоящее время значительный интерес для микро– и оптоэлектроники представляют наноструктурные материалы, обладающие особыми электрическими, оптическими и механическими свойствами. Важными параметрами материала являются температура Дебая, модули Юнга и сдвига, коэффициент Пуассона и др., которые можно определить с помощью измерений скоростей звука поперечных и продольных волн. Часто размеры исследуемых образцов не позволяют измерить скорости распространенным методом, описанным в литературе [1–4].

В рамках данной работы разработаны специальные схемы измерения скоростей с использованием одной или двух (для образцов с малой толщиной) призм в качестве среды задержки (рис. 1). В качестве тестовых экспериментов при помощи предложенных методов определялись скорости поперечных волн четырех образцов нанокерамики на основе  $Al_2O_3$  различной толщины ( $d_1 = 7.46$  мм,  $d_2 = 7.1$  мм,  $d_3 = 6.78$  мм,  $d_4 = 1.56$  мм).



приемник, *l*, *t* — продольная и поперечная

волны.

Методика определения скорости поперечных волн: наклонный пьезопреобразователь (ПЭП) 1 является источником продольных ультразвуковых волн l. На границе ПЭП 1 — алюминиевая призма 2 они трансформируются в поперечные волны t, проходят через призму и тонкий контактный слой (силикатный клей) 3 перпендикулярно образцу 4, через вторую призму попадают на приемный ПЭП 5.

Скорость поперечных волн в данном методе рассчитывается по формуле:

$$C_t = \frac{2D}{t},\tag{1}$$

Рис. 1. Схема измерения скорости поперечных волн. 1 — излучатель, 2 — призма, 3 — пульсами. слой контактной жидкости, 4 — образец, 5 — Измерения проводились с использованием одной

измерения проводились с использованием однои или двух призм при помощи ультразвукового дефектоскопа OLYMPUS Epoch 1000 в импульсном режиме.

Результаты измерений значений скоростей поперечных волн получились с маленькой погрешностью (например, при использовании двух призм и измерении на частоте 5 МГц:  $C_{t1} = 3700 \pm 80$  м/с,  $C_{t2} = 3100 \pm 60$  м/с,  $C_{t3} = 5100 \pm 100$  м/с,  $C_{t4} = 100$ 

 $3700 \pm 200$  м/с). Данный метод можно использовать для измерения скорости поперечных волн.

1. Мэзон У., Физическая акустика. Методы и приборы ультразвуковых исследований, Мир (1966).

2. Клюев В.В., Неразрушающий контроль: справочник в 7 томах, т. 3: Ультразвуковой контроль, Машиностроение (2004).

3. Агранат Б.А., Дубровин М.Н., Хавский Н.Н., Основы физики и техники ультразвука, Высш. шк. (1987).

4. Зацепин А. Ф., Введение в физику акустического контроля, ГОУ ВПО УГТУ-УПИ (2005).

# Акустические свойства и упругие константы нанокерамики Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

#### Перевозчикова Ю.А.\*, Бунтов Е.А., Зацепин А.Ф.

#### Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: j-perevozchikova@mail.ru

Наноструктурные материалы обладают особыми свойствами, поэтому они важны во многих сферах техники и технологии. В частности, нанокерамика значима для микро– и оптоэлектроники, так как используется в качестве подложек микросхем. Поэтому в ней важно сочетание физико–механических свойств. Важными параметрами материала являются модули Юнга и сдвига, коэффициент Пуассона и др., которые можно определить с помощью измерений скоростей звука поперечных и продольных волн.

В данной работе исследовались три образца нанокерамики, полученные с завода электронного приборостроения ОАО «Элион», Зеленоград. По данным рентгеновской дифракции, размер областей когерентного рассеяния — 100–150 нм. Толщина образцов:  $d_1 = 7.46$  мм,  $d_2 = 7.1$  мм,  $d_3 = 6.78$  мм. Плотности образцов:  $\rho_1 = 3555$  кг/м<sup>3</sup>,  $\rho_2 = 3522$  кг/м<sup>3</sup>,  $\rho_3 = 3731$  кг/м<sup>3</sup>.

Для определения упругих свойств были измерены скорости продольных и поперечных волн. Определение скорости распространения продольных волн проводилось на установке, состоящей из двух преобразователей (с частотой 5 МГц), один из которых является источником сигнала, а другой — приемником. Между ними ставится исследуемый образец. Сигнал, принятый вторым преобразователем, поступает на персональный компьютер. С помощью специальной программы происходит расчет значения продольной скорости ультразвука в образце. Для определения скорости распространения поперечных волн была разработана схема, позволяющая провести измерения в одной точке образца, в которой поперечная волна отражалась бы перпендикулярно от грани изделия, подобно измерению продольных волн, так как размеры образцов нанокерамики не позволяют измерить скорости поперечных волн стандартным методом, описанным в литературе [1–3]. Для этого использовалась специальная среда задержки, проводящая поперечные волны. В качестве этой среды использовалась алюминиевая призма специальной формы. Измерения проводились при помощи ультразвукового дефектоскопа OLYMPUS Epoch 1000 в импульсном режиме.

В результате сравнительного анализа результатов исследования обнаружено, что скорости поперечных волн увеличиваются с увеличением плотности образцов ( $C_{l1} = 9.9 \text{ км/c}$ ,  $C_{l2} = 9.9 \text{ км/c}$ ,  $C_{l3} = 8.7 \text{ км/c}$ ), однако для скоростей продольных волн зависимость обратная, что не характерно для объемной керамики ( $C_{t1} = 4.2 \text{ км/c}$ ,  $C_{t2} = 4.1 \text{ км/c}$ ,  $C_{t3} = 5 \text{ км/c}$ ). Аналогичные соотношения получаются и в случае акустических импедансов. Модули Юнга и сдвига при небольшом увеличении плотности увеличились на десятки ГПа. Коэффициенты Пуассона исследуемой нанокерамики близки к значениям коэффициентов для металлов (порядка 0.3). На основе полученных результатов также было установлено различие скоростей в каждом образце на частотах 2.5; 5 МГц, что указывает на проявление дисперсии скорости. Однако зависимости сохраняются. Полученные результаты свидетельствуют об уникальных свойствах нанокерамики, которые можно использовать в дальнейшем в микроэлектронике.

- 1. Мэзон У., Физическая акустика. Методы и приборы ультразвуковых исследований, Мир (1966).
- 2. Епифанов Г.И., Физика твердого тела: учебное пособие, Лань (2011).
- 3. Зацепин А.Ф., Введение в физику акустического контроля, ГОУ ВПО УГТУ-УПИ (2005).

### ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАННОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА

<u>Песин М.В.</u><sup>1,2\*</sup>, Макаров В.Ф.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия <sup>2</sup>ООО «Пермская компания нефтяного машиностроения», Пермь, Россия \*e-mail: m.pesin@mail.ru

Влияние остаточных напряжений на деталь является существенным при рассмотрении усталостной прочности конструкции изделия. В машиностроении резьбы нашли широкое применение в различных деталях, а повышенные эксплуатационные требования к ним требуют от конструкторов совершенствования существующего профиля или разработки новых резьб. Есть иной подход в решении задачи повышения надежности резьб — упрочнение уже имеющейся резьбы. На сегодняшний день известные методы упрочнения резьб не имеют практических рекомендаций, а также технологии обкатки впадины резьбы для использования ее в условиях цеха машиностроительного предприятия, данная задача является существенно нелинейной вследствие контактных граничных условий. Актуальность этого направления можно рассмотреть на примере замковой резьбы бурильной трубы. Так, в процессе бурения скважин используются трубы, одной из основных причин отказа которых является разрушение резьбового соединения «ниппель–муфта».

Теоретическое исследование влияния параметров технологического процесса обкатки резьбовой поверхности бурильных труб на формирование основных характеристик упрочненного поверхностного слоя: величину остаточных напряжений, микротвердость и шероховатость является актуальным. Для решения этой проблемы автором разработаны физическая и математическая модели расчета параметров упрочняющей обработки впадины резьбы [1]. Инженерные модели позволяют на этапе проектирования определить технологические параметры упрочняющей обработки впадины резьбы, оценить эффективность обработки, величину остаточных напряжений и микротвердости.

Анализ результатов моделирования в программном комплексе ABAQUS с использованием динамического подхода, т.е. ролик перемещается вдоль впадины резьбы со скоростью 0.5 м/с, учитываемой в программе, показал, что в процессе обкатки резьбы роликом в приповерхностных слоях материала межвитковой впадины резьбы формируются области сжимающих напряжений, что приводит к упрочнению этого слоя и препятствует возникновению микротрещин. Уникальность полученных результатов математического моделирования состоит в разработке постановки задачи математического го моделирования обкатки впадины резьбы роликом и разработки математической модели для выполнения численного эксперимента. В результате создана программа для ЭВМ РКNM Deep Roll Thread v 1.0 («Обкатка резьбы роликом ПКНМ версия 1.0») № 2014610774, позволяющая определять напряжения в резьбе при ее обкатке. Полученные данные можно применить и для других высоконагруженных резьб.

1. Песин М.В., Известия Юго–Западного государственного университета. Серия «Техника и технологии» **4**, 43–47 (2013).

# Анализ напряженно–деформированного состояния профильной конической поверхности в трехмерной постановке

#### Песин М.В.

#### Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия ООО «Пермская компания нефтяного машиностроения», Пермь, Россия e-mail: m.pesin@mail.ru

В настоящее время исследование влияния режимов и условий технологического процесса обкатки резьбовой конической поверхности бурильных труб на формирование основных характеристик упрочненного поверхностного слоя является актуальным в связи со значительными затратами на устранение аварий, вызванных разрушением резьбового соединения. Величина остаточных напряжений, перемещений поверхностного слоя после нагружения, микротвердость и шероховатость, оказывающих прямое воздействие на усталостную прочность и надежность работы бурильных труб, приводит к задаче прогнозирования этих параметров с использование различных программных комплексов.

Методология теоретических исследований включает разработку физических и математических моделей для расчета остаточных напряжений, упругих, а также пластических деформаций резьбы. В результате расчетов появляется возможность на этапе проектирования определить технологические параметры упрочняющей обработки впадины резьбы, эффективность обработки, величину остаточных напряжений и микротвердости. Разработанная методология в рамках численных расчетов рассматривает две модели в статической и динамической постановке. Статическая математическая молель позволяет получить графические изображения зависимостей пластических деформаций, возникающих в резьбе от прикладываемых статических нагрузок и диаметра ролика. Для решения задачи в статической постановке, т.е. перемещение ролика вдоль впадины, резьбы не учитываются, представлена физическая модель конической резьбы с консольным закреплением ее фрагмента и приложенной на ролик нагрузки. При формировании физической модели были приняты следующие допущения: не учитывается действие силы трения; влияние напряжений в конструкции на ее жесткость не учитывается; не учитываются эффекты термопрочности; в зоне контакта рассматривается полное прилипание; стенки конструкции не нагреваются и не поглощают тепло; расчеты проводились без учета гравитации, т.к. предварительные вычислительные эксперименты показали, что результаты с учетом и без учета близки. В соответствии с принятой физической моделью автором была разработана математическая, описывающая упругие и пластические процессы для каждого из двух контактирующих тел. Разработанная математическая модель состоит из краевых условий, уравнения равновесия, геометрических соотношений для деформируемой сплошной среды.

Анализ результатов расчетов по статической математической модели выявил следующие особенности: существенного изменения геометрии резьбы, а также изменение зазоров при свинчивании ниппеля с муфтой, натягов, после обкатки впадин витков резьбы роликом не наблюдается; обкатка роликами впадин резьбы создает благоприятные сжимающие напряжения для всех исследуемых диаметров резьбы (86 мм, 102 мм, 122 мм) при различных радиусах прокатного ролика, т.к. ведется пересчет площади контакта ролика и впадины резьбы; возможно прогнозирование величины остаточных напряжений за счет изменения силы прижатия ролика и радиуса при его вершине; повышение силы прижатия ролика увеличивает величину сжимающих остаточных нормальных напряжений, наблюдается нелинейный рост суммарных остаточных напряжений при линейном увеличении нагрузки. В результате численного эксперимента был подобран диаметр ролика, радиус при его вершине и максимальные перемещения для соответствующих нагрузок.

# Динамика решетки редкоземельных титанатов со структурой пирохлора $R_2$ Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (R = Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu): *ab initio* расчет

Петров В.П.\*, Чернышёв В.А., Никифоров А.Е.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: lancervlad@gmail.com

Интерес к редкоземельным (P3) титанатам  $R_2$ Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> не ослабевает благодаря многообразию оптических и магнитных свойств этих материалов [1,2]. Оптический спектр f-f переходов P3 ионов содержит большое количество фононных повторений [3], для его интерпретации и выделения электронных переходов необходима информация о частотах и типах колебаний решетки. Наиболее адекватно фононный спектр воспроизводится из современных первопринципных расчетов периодических структур, что позволяет воспроизвести все моды данной структуры.

Титанаты  $R_2$  Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> с P3 ионами из второй половины ряда имеют высокосимметричную структуру пирохлора Fd3m [4], фононные спектры некоторых из них исследованы экспериментально [5,6].

*Ab initio* расчет кристаллической структуры и фононного спектра в редкоземельных титанатах  $R_2$ Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (R = Gd–Lu) был выполнен в рамках МО ЛКАО подхода в программе CRYSTAL09 с использованием гибридных функционалов DFT B3LYP и PBE0. Определены частоты и типы фундаментальных колебаний. Для R = Tb, Tm, Yb подобный расчет выполнен впервые, причем для Tm и Yb в печати отсутствует информация об экспериментальных исследованиях фононного спектра.

Также было исследовано влияние гидростатического давления до 35 GPa на структуру, динамику и упругие свойства решетки  $Gd_2Ti_2O_7$ . Получена зависимость частот фононов от давления. Расчеты предсказывают, что в диапазоне до 35 GPa относительное изменение объема структуры пирохлора при сжатии хорошо описывается уравнением состояния Берча–Мурнагана 3–го порядка. Результаты расчетов согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Показано, что можно получить хорошее описание структурных, динамических и упругих свойств кристаллической решетки  $R_2Ti_2O_7$ , включив 4f оболочку P3 иона в псевдопотенциал.

Работа выполнена при финансовой поддержке УрФУ в рамках реализации Программы развития УрФУ для победителей конкурса «Молодые ученые УрФУ» (This research project has been supported by UrFU under the Framework Programme of development of UrFU through the «Young scientists UrFU» competition).

- 1. Subramanian M.A., Aravamudan G., Subba Rao G.V., Prog. Solid State Chem. 15(2), 55 (1983).
- 2. Lin K.-M., Lin C.-C., Li Y.-Y., Nanotechnology 17(6), 1745 (2006).
- 3. Климин С.А., Попова М.Н., Чукалина Е.П., Малкин Б.З., Закиров А.Р., Antic–Fidancev E., Goldner Ph., Aschehoug P., Dhalenne G., ФТТ **47**(8), 1376 (2005).
- 4. Li Q.J., Xu L.M., Fan C., Zhang F.B., Lv Y.Y., Ni, B., Zhao Z.Y., Sun X.F., Journal of Crystal Growth 96, 377 (2013).
- 5. Lummen T.T.A., Handayani I.P., Donker M.C., Fausti D., Dhalenne G., Berthet P., Revcolevschi A., van Loosdrecht P.H.M., Phys. Rev. B 77, 214310 (2008).
- 6. Maczka M., Sanjuan M.L., Fuentes A.F., Macalik L., Hanuza J., Matsuhira K., Hiroi Z., Phys. Rev. B **79**, 214437 (2009).

# Структурные превращения в сплавах $R(Fe_{1-x}Co_x)_2$ под действием спонтанно поглощенного водорода

<u>Сташкова Л.А.</u>\*, Гавико В.С., Мушников Н.В., Терентьев П.Б.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: lshreder@imp.uran.ru

В настоящее время твердо установлено, что практически все металлы и сплавы содержат некоторое количество водорода, локализованного в порах, ядрах дислокаций, микротрещинах, либо занимающего междоузлия решетки [1]. Механизм спонтанного гидрирования остается не до конца ясным. Наиболее вероятным представляется предположение о реакции расщепления паров воды, адсорбированных поверхностью. Спонтанное поглощение водорода может приводить к интересным структурным эффектам, рассмотрению которых посвящена данная работа.

При малых концентрациях атомы водорода, как правило, занимают междоузлия решетки статистически. В случае образцов с большой отрицательной магнитострикцией, кубической симметрией и осью легкого намагничивания типа <111> решетка сжата вдоль той кристаллографической оси <111>, вдоль которой лежит вектор спонтанной намагниченности. Такая ромбоэдрическая магнитоупругая деформация решетки может инициировать упорядочение водорода, что, в частности, может проявиться в резком увеличении степени ромбоэдрических искажений кубической решетки.

Для изучения структурных превращений в исследуемых интерметаллидах при длительной выдержке на воздухе был выбран состав  $R(Fe_{1-x}Co_x)_2$ , (R — Sm, Tb), поскольку при данной концентрации кобальта наблюдается максимальная неупругая деформация решетки при упорядочении водорода. Рентгеноструктурные исследования проводили при комнатной температуре на порошковых образцах со средним размером зерна ( $36\div 63$ ) мкм на дифрактометре ДРОН-6 в монохроматизированном Сг– $K_{\alpha}$  излучении.

После выдержки на воздухе в течение 10 месяцев ромбоэдрические искажения в образце сплава  $Sm(Fe_{0.2}Co_{0.8})_2$  увеличились в 4 раза. Равновесная концентрация водорода составила (3±1.5) ат.%, что соответствует формуле  $Sm(Fe_{0.2}Co_{0.8})_2H_{0.1}$ . Рентгеноструктурный анализ позволил зафиксировать увеличение объема элементарной ячейки при поглощении водорода примерно на 0.5 %. При дальнейшем увеличении времени выдержки количество поглощенного водорода оставалось неизменным, в состоянии насыщения значение степени немагнитоупругой ромбоэдрической деформации гидрида составило  $\varepsilon = -8.28 \cdot 10^{-3}$ . Экспериментально показано, что обнаруженные в соединениях  $Sm(Fe_{0.2}Co_{0.8})_2$  структурные искажения решетки обусловлены процессами упорядочения водорода под действием исходной магнитоупругой ромбоэдрической деформации решетки.

Кроме того, проведено исследование влияния величины и знака исходной магнитоупругой деформации на искажение решетки, вызванное упорядочением водорода при замещении Sm на Tb, а также рассчитаны размеры междоузлий, доступных для заполнения водородом. Показано, что с ростом содержания тербия происходит уменьшение индуцированной водородом деформации немагнитоупругой природы и для всех образцов междоузлия типа AB<sub>3</sub> имеют больший радиус, чем A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>.

Работа выполнена при поддержке Программы УрО РАН (проект №12-П-2-1050м).

1. Уоллейс У., Магнитные свойства гидридов металлов и интерметаллических соединений. Водород в металлах, М: Мир (1981).

# Схлопывание толстой стальной цилиндрической оболочки под действием взрыва

Зельдович В.И.<sup>1</sup>, Фролова Н.Ю.<sup>1</sup>, Хейфец А.Э.<sup>1</sup>\*, Шорохов Е.В.<sup>2</sup>, Долгих С.М.<sup>2</sup>, Гаан К.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>РФЯЦ-ВНИИТФ им. академика Е.И. Забабахина, Снежинск, Россия \*e-mail: kheifetz@imp.uran.ru

Цилиндрическая оболочка (труба) с внутренним диаметром 106.6 мм и толщиной стенки 5.7 мм из низкоуглеродистой стали 20 была подвергнута действию сходящейся ударной волны. Обжатие осуществлялось с боковой поверхности цилиндра в режиме скользящей детонации. Ударная волна, движущаяся со скоростью ≈ 6 мм/мкс, преодолела стенку оболочки за время ≈ 1 мкс. Под действием ударной волны вещество трубы приобрело массовую скорость ≈ 1 мм/мкс в радиальном направлении, и начался процесс инерционного квазиадиабатического схождения оболочки. В результате был получен сплошной цилиндр диаметром ≈ 50 мм, поверхность которого имела характерное «ребристое» строение. Регистрация процесса схождения была выполнена рентгеновским методом и с помощью электроконтактных датчиков, расположенных вдоль оси цилиндра. Время схлопывания в поперечном сечении составляло 30 мкс. Давление в ударной волне, оцененное по массовой скорости оболочки, составляло ≈ 40 ГПа. Усредненная степень деформации в радиальном направлении, определенная по изменению формы участка оболочки, составила ≈80%.

Установлено, что структуру полученного цилиндра можно разделить на три зоны. В наружной зоне толщиной ≈ 4 мм преобладает действие ударной волны с амплитудой давления, существенно превышающего критическое давление  $\alpha \to \epsilon$  перехода. В средней зоне толщиной  $\approx 8$  мм, которая имеет четкую границу с наружной зоной, большие пластические деформации сжатия приводят к повышению температуры и к возникновению «внутреннего давления» — квазигидростатических сжимающих напряжений, величина которых соответствует динамическому пределу прочности при данной скорости деформации ( $\approx 1$  ГПа). Наблюдаемые изменения в микроструктуре второй зоны и резкое повышение микротвердости на внешней границе зоны до уровня закаленной стали указывают на протекание  $\alpha \to \gamma$  превращения. Как следует из T - P диаграммы железа, сопоставленной с изэнтропами сжатия, вследствие повышенного давления температура α → γ перехода снижается. Из-за того, что время пребывания вещества в ү-области фазовой диаграммы ограничивается временем действия внутреннего давления, то есть не превышает 30 мкс, образовавшаяся в средней зоне структура «баротермической» закалки крайне необычна. В обычных условиях нагрева (без давления) образование аустенита начинается на границах перлит/феррит и в перлите, а затем происходит превращение свободного феррита. В нашем случае действие давления и деформации изменяет «привычный» механизм α → γ превращения: оно начинается в свободном феррите; участки исходного перлита испытывают пластическую деформацию, но не превращаются в аустенит. Очевидно, что для диффузионного процесса растворения цементита и, соответственно, превращения перлита в аустенит недостаточно времени пребывания в ү-области.

В центральной зоне преобладает действие высокой температуры, которое обусловлено дальнейшим увеличением степени и скорости деформации. После исчезновения давления вещество попрежнему остается в γ-области, поэтому начинается превращение в аустенит участков перлита. Полное превращение структуры стали в аустенит и снижение микротвердости вблизи оси цилиндра до значений, характерных для отожженной стали, свидетельствует о нагреве выше 900 °С.

Работа выполнена по плану РАН (тема «Структура» № г. р. 01.2.006 13392) в рамках Программы УрО РАН № 12–П–2–1009.

# Неразрушающий контроль

# Особенности накопления и термовысвечивания дозиметрической информации детекторами ТЛД–500 при высокодозном облучении

<u>Абашев Р.М.</u><sup>1\*</sup>, Сюрдо А.И.<sup>1,2</sup>, Мильман И.И.<sup>2</sup>, Власов М.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт промышленной экологии УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: ren-crassi@mail.ru

Накопительные термолюминесцентные (ТЛ) детекторы ТЛД-500 на основе анионодефицитного корунда получили широкое распространение в индивидуальном дозиметрическом контроле. Их ТЛ выход в основном дозиметрическом пике при 450 К в двойных логарифмических координатах линеен в диапазоне поглощенных доз  $10^{-5} - 1$  Гр, а в ТЛ спектре преобладающим является свечение F–центров при 3.0 эВ. В [1] с использованием высокотемпературной термолюминесценции при 830 К нами продемонстрирована возможность расширения измеряемого диапазона в область больших и сверхбольших доз D, характерных для радиационных технологий и контроля. Обнаружено также, что при импульсном облучении дозами выше 1 Гр рост интенсивности основного дозиметрического пика при 450 К замедляется. Одновременно с увеличением *D* последовательно возникают высокотемпературные ТЛ пики при 570, 730 и 830 К. Однако малоизученными остаются специфика перераспределения накопленной энергии ионизирующих излучений между основным и указанными высокотемпературными ТЛ пиками, их спектральные характеристики. Поэтому целью данной работы является исследование особенностей процессов накопления и высвечивания дозиметрической информации в основном и высокотемпературных ТЛ пиках при высокодозном облучении с одновременным контролем кинетических параметров, степени заполнения обуславливающих их ловушек, а также изучение их спектров свечения и оптического обесцвечивания.

Обнаружено, что в спектре ТЛ пика при 830 К имеется одна полоса свечения с максимумом  $h\nu_m = 4.25$  эВ и полушириной FWHM = 1.06 эВ. Для него также исследован спектр оптического обесцвечивания, имеющий  $h\nu_m = 5.2$  эВ и FWHM = 1.6 эВ. Полученные результаты имеют важное практическое значение для ТЛ дозиметрии. Доминирующее УФ–свечение в ТЛ пике при 830 К позволяет увеличить при считывании соотношение сигнал–шум на фоне ИК–излучения нагревателя. Наличие максимума обесцвечивания в области жесткого ультрафиолета предполагает низкую светочувствительность для пика при 830 К в отличие от подобной для основного ТЛ пика.

Установлено, что среди исследованных имеются детекторы с существенно отличающимися ТЛ откликами в пике при 830 К. Из них можно выделить группы с линейными дозовыми зависимостями для диапазонов  $10^3-10^5$  Гр и  $10^4-6\cdot10^6$  Гр. В части детекторов, облученных дозами до  $10^5$  Гр, высокотемпературный пик при 830 К не регистрируется. С использованием ступенчатого отжига в области температур 500–1200 К показано, что значительное влияние на светосуммы, высвечиваемые в пиках при 450 и 570 К, оказывает степень заполнения ловушки, высвечиваемой при 730 К. При ее опустошении ТЛ отклики при 450 и 570 К снижаются в 2–5 раз. В противоположность отмеченному, отжиг ТЛ пика при 830 К существенно слабее влияет на ТЛ отклики в пиках при 450 и 570 К. Получено также, что степень заполнения ловушек, ответственных за ТЛ пики при 570, 730 и 830 К, влияет не только на дозиметрические, но и на кинетические параметры ТЛ пика при 450 К: положение максимума, полуширина, порядок кинетики.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект №14–02–31522). 1. Сюрдо А.И., Мильман И.И. и др., Письма в ЖТФ **40** (23), 22 (2014).

### Скользящая рентгеновская дифракция в кристалле с приповерхностными дефектами

Голентус И.Э.\*, Гаевский А.Ю.

Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАНУ, Киев, Украина \*e-mail: transilv@mail.ru

В работе представлен теоретический анализ скользящего диффузного рассеяния рентгеновских лучей в кристалле с приповерхностными дефектами. Из–за малости углов регистрации для скользящей дифракции актуальна проблема разделения диффузной и когерентной составляющих излучения. Благодаря высокой чувствительности угла выхода зеркально дифрагированной волны к малейшим отклонениям падающей волны от брэгговского угла [1] нами показано, что диффузная и когерентная составляющие могут быть пространственно разделены путем должного выбора угловых параметров.

Задача определения интенсивности диффузного рассеяния решается в рамках борновского приближения искаженной волны, в котором в качестве нулевого приближения выбираются решения динамической задачи рассеяния на полуограниченном идеальном кристалле [1]. Для дефектов типа центров дилатации получены аналитические выражения для сечения рассеяния [2]. Согласно кинематическому приближению скользящей дифракции [3], основная часть диффузного рассеяния концентрируется вблизи углов выхода, отвечающих критическому углу. Как показано в данной работе, динамическая модель дает расщепление диффузной компоненты по углу выхода в области сильного взаимодействия между рассеянными волнами (Рис. 1). Расчет сечения рассеяния представлен для сканирования вблизи рефлекса Si(220) с  $\lambda = 1.54$  Å(критический угол  $\alpha_c \approx 3.9$  мрад). Считалось, что дефекты хаотически распределены в плоском слое на глубине 50 Å. Сканирование производится по углу поворота образца  $\omega$  вокруг нормали и вертикальному перемещению точечного детектора (угол  $\alpha_p$ ). В положении  $\omega = 0$  падающий волновой вектор **k** удовлетворяет точному брэгговскому условию, тогда как рассеянный волновой вектор **р** отклоняется от латеральной проекции угла Брэгга на величину  $\Delta \omega_B$ .



Рис. 1. Слева — распределение интенсивности в координатах ( $\omega$ ,  $\alpha_p$ ); угол падения равен  $\alpha_c$ ,  $\Delta \omega_B = -0.1$  мрад. Штрих–пунктирная линия изображает множество точек обратного пространства, которые отвечают выполнению точного брэгговского условия для диффузно рассеянных волн. Справа — горизонтальный срез карты на уровне  $0.9\alpha_c$  для кинематического (пунктирная линия) и динамического (сплошная линия) приближений.

1. Afanasiev A.M., Melkonyan M.K., Acta Cryst. A 39, 207 (1983).

- 2. Гаевский А.Ю., Голентус И.Э., Молодкин В.Б., МФиНТ 36, 401 (2014).
- 3. Grotehans S., Wallner G. et al., Phys. Rev. B 39, 8450 (1989).

### Определение фазового состава аустенитных коррозионностойких сталей

#### Корх М.К.\*, Ригмант М.Б., Ничипурук А.П.

#### Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: k\_m\_k@mail.ru

Аустенитные хромоникелевые стали имеют отличительный комплекс механических свойств: при относительно низком пределе текучести они обладают высокой пластичностью, вязкостью разрушения, повышенной коррозионной стойкостью, хорошей технологичностью. Такое сочетание свойств обуславливает создание металлоемких конструкций из аустенитных сталей, в том числе и ответственного назначения, работающих в агрессивных средах.

Качество аустенитных сталей определяется прежде всего их фазовым составом. Кроме основной фазы аустенита ( $\gamma$ -фазы), в материале стали может содержаться исходный феррит ( $\alpha$ -фаза), а при изготовлении и эксплуатации под воздействием пластических деформаций может образовываться фаза мартенсита деформации ( $\alpha'$ -фаза). При этом содержание феррита остается неизменным. Феррит и появляющийся мартенсит деформации существенным образом влияют на эксплуатационные свойства аустенитных сталей. Например, при отсутствии или малом содержании феррита возникают проблемы с получением качественных сварных швов, а повышенное содержание феррита (более 8–10%) может отрицательно влиять на окисление и общую коррозию металла и сварных соединений. Образующийся при деформациях мартенсит в свою очередь напрямую влияет на пластичность и степень охрупчивания сталей, особенно в зонах концентрации напряжений. Таким образом, разработка методов и средств контроля, позволяющих определить фазовый состав аустенитных сталей, является в сактуальной и востребованной задачей.

В отличие от аустенита, фазы феррита и мартенсита деформации обладают выраженными ферромагнитными свойствами. Следовательно, для определения процентного содержания ферромагнитных включений в парамагнитном материале наиболее удобными и информативными оказываются методы и средства магнитного контроля. Но, как показали исследования, при одновременном присутствии в аустенитной стали феррита и мартенсита деформации существующие в настоящее время методы и средства магнитного контроля не позволяют с высокой точностью определить, какую долю из общего объема магнитных включений в аустените составляет феррит, а какую мартенсит деформации. Например, хорошо известный метод магнитного насыщения способен дать информацию лишь о суммарном содержании феррита и мартенсита, так как величины намагниченности насыщения этих фаз очень близки по своим значениям.

Авторами были изучены различные магнитные свойства фаз феррита и мартенсита деформации, и в качестве основного параметра была выбрана дифференциальная магнитная восприимчивость ( $\chi_d$ ). Такой выбор обусловлен тем, что кривая зависимости  $\chi_d$  от величины намагничивающего поля (H) имеет двойные пики или перегибы в тех случаях, когда в материале присутствуют и феррит и мартенсит деформации. Применяя аппроксимацию функцией Лоренца, авторы «восстановили» зависимости  $\chi_d(H)$  для каждой присутствующей в материале ферромагнитной фазы. Площадь под кривой  $\chi_d(H)$  является, по сути, намагниченностью, а намагниченность материала прямо пропорциональна содержанию в нем ферромагнитных включений. Все это позволило авторам работы, используя систему уравнений, связывающих между собой намагниченность фаз и их содержание в материале, с высокой точностью определить процентное содержание феррита и мартенсита деформации при их одновременном присутствии в составе аустенитной хромоникелевой стали.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Диагностика» №01201463329 (проект № 12–П–2–1031), программы ОФИ УрО РАН № 13–2–052–УВГ.

### Акустическая визуализация процессов разрушения мартенситно–стареющей стали ЧС–5ВИ, подвергнутой пластической деформации

Корх Ю.В.\*, Сташков А.Н.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: julika\_sun@mail.ru

Визуализация поверхностной и подповерхностной структуры различных объектов с помощью сканирующей акустической микроскопии позволяет получить качественно новую информацию об исследуемом объекте по сравнению с другими методами микроскопии. Способность высокочастотных акустических волн проникать вглубь различных материалов дает возможность без разрушения изделия получать пространственные изображения внутренней структуры объектов, в том числе из оптически непрозрачных материалов. Высокая чувствительность акустических волн к локальному изменению физико–механических свойств материала, а также наличию микронесплошностей и разрывов среды определяет высокий контраст акустических изображений и позволяет оценить тип и концентрацию накапливающихся повреждений на различных глубинах материала.

В данной работе с помощью метода сканирующей акустической микроскопии [1] проводилось систематическое изучение процессов разрушения образцов из мартенситно–стареющей стали ЧС–5ВИ (С – 0.01; Ni – 18.30; Ti – 0.78; Мо – 3.33 вес.%). Особенностью мартенситно–стареющих сталей является их высокая прочность при хорошей пластичности и низкой склонности к хрупкому разрушению, что широко используется в авиационной промышленности, судо– и ракетостроении, при производстве тонкостенных конструкций двигателей и газогенераторов [2]. Исследуемые образцы размером  $3 \times 3 \times 60$  мм после термообработки (закалки и старения при 350, 560, 580 и 660°С) подвергались пластической деформации растяжением вплоть до их разрушения. Различные режимы термообработки влияли на механические свойства образцов и их устойчивость к нагрузкам. В работе получены акустические изображения развивающихся повреждений в зонах концентрации напряжений на различных этапах деформации образцов (Рис. 1). На различных этапах деформирования образцов визуализированы процессы охрупчивания мартенситно–стареющей стали при различном содержании остаточного аустенита (от 2 до 40%) в ее мартенситной матрице.





Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Диагностика» №01201463329 (проект №12–П–2–1057) при поддержке РФФИ (проект №12–08–33098 мол\_а\_вед).

1. Корх Ю.В., Бурханов А.М., Ринкевич А.Б., Дефектоскопия 10, 16 (2009).

2. Сташков А.Н., Сомова В.М. и др., Дефектоскопия 12, 41 (2013).

# Применение метода акустической микроскопии для исследования тонких пленок

Корх Ю.В.\*, Владимиров А.Б.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: iulia.korkh@yandex.ru

Твердые износостойкие защитные покрытия обладают прекрасными свойствами для упрочнения поверхностей режущих инструментов, фрикционных деталей. Однако накапливающиеся во время эксплуатации внутренние напряжения ослабляют адгезию таких покрытий к подложке. Это приводит к отслаиванию, возникновению и распространению системы трещин, что ограничивает ресурс работы защитных покрытий на реальных изделиях. Высокая локальность метода акустической микроскопии [1] и возможность послойной визуализации представляют интерес при комплексном исследовании получаемых однослойных и многослойных защитных покрытий, качества адгезии их слоев, износостойкости, однородности распределения локальных упругих свойств тонких пленок.

В данной работе исследуется чувствительность сфокусированных высокочастотных упругих волн с частотой излучения f = 400-450 МГц к изменению локальных упругих свойств и наличию микродефектов в образцах с напыленными твердыми алмазоподобными покрытиями, а также покрытиями системы титан-углерод TIC/А-С:Н, получаемых одновременным вакуумно-дуговым осаждением титана (Ti) и углерода (С) в аргон-ацетиленовой среде низкого давления. Получены акустические изображения поверхности и подповерхностной области однослойных и многослойных тонких пленок, напыленных при различных режимах на подложки из разных материалов. Разрешающая способность используемой установки высокочастотного сканирующего акустического микроскопа на данной частоте излучения составляет 1,5-2 мкм. Это позволяет визуализировать точечные микронесплошности, развивающиеся под поверхностью тонких пленок, сравнить степень износа поверхности пленок во время испытаний. Интерес представляет выделение особенностей на акустическом изображении, связанные с взаимодействием сфокусированных акустических волн с многослойными пленками, толщина слоев которых не превышает 50 нм. Несмотря на то, что зондирующие акустические волны имеют значительно большую длину волны (почти в 100 раз больше), чем толщина отдельного слоя, на акустических изображениях многослойных покрытий получены интерференционные картины, связанные с взаимодействием упругих волн со множеством слоев.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Диагностика» №01201463329 (проект №12–П–2–1057).

1. Ринкевич А.Б., Корх Ю.В., Смородинский Я.Г., Дефектоскопия 1, 14 (2010).

# Экспериментальная оценка критических полей смещающихся доменных границ на образцах из низкоуглеродистой стали после воздействия пластической деформации

Ничипурук А.П., <u>Огнева М.С.</u>\*, Сташков А.Н.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: ogneva66@mail.ru

Для достоверного определения напряженно–деформированного состояния объекта перспективными являются магнитные методы. Однако используемые магнитные параметры, измеряемые на кривой намагничивания или петле гистерезиса, имеют неоднозначное поведение в зависимости от приложенных или остаточных напряжений, особенно при больших растягивающих деформациях перед моментом разрушения материала. Как известно, механические напряжения влияют в основном на движение 90–градусных доменных стенок, а вклад в изменение большинства «классических» магнитных свойств одновременно вносят движение двух типов доменных границ. Перспективы контроля упругих деформаций (напряжений) лежат в области изучения перераспределения обратимых и необратимых процессов перемагничивания и разделения вкладов в процессы перемагничивания 90– и 180–градусных доменных границ.

С целью экспериментального определения критических полей смещения 90–градусных доменных границ на образцах измеряли с помощью измерительной обмотки полевые зависимости ЭДС, пропорциональной результирующей дифференциальной проницаемости, возникающей под действием суперпозиции переменного циркулярного поля постоянной амплитуды и изменяющегося в широких пределах квазистатического продольного поля, создаваемого соленоидом.

В ходе эксперимента были получены зависимости ЭДС в измерительной обмотке от величины поля соленоида, которые представляют собой трехгорбые кривые с центральным пиком в районе нулевого поля. Особенность данных зависимостей заключается в том, что правые и левые максимумы лежат в разных полях, что связано с различным вкладом в процессы перемагничивания 90– и 180–градусных доменных границ. Стоит отметить, что для недеформированного образца при данной схеме измерения наблюдалась вполне «классическая» зависимость с одним пиком.

Полученные результаты, в частности поля правых максимумов, сравнивали с критическими полями  $H_{90}$ , получаемыми из экспериментальных зависимостей  $\chi_{\text{диф}}(H)$  путем расчета по модели [1]. Данное сравнение показало удовлетворительное совпадение теоретических расчетов с экспериментальными данными.

В результате проведенных исследований было показано, что предложенная оригинальная методика позволяет экспериментально оценить величину критических полей смещения 90–градусных доменных границ. Найден параметр, связанный с полем наведенной магнитной анизотропии. В случае, если эта анизотропия наведена внешними деформационными воздействиями, то можно оценивать уровень остаточных напряжений в деформированном металле.

Для практической реализации разработанной методики был сконструирован специальный малогабаритный датчик и проведены измерения на массивных образцах.

Данная работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Диагностика» №01201463329 (проект № 12–П–2–1031), при поддержке ОФИ УрО РАН (проект № 13–2–052–УВГ) и РФФИ (проект №12–08–33098 мол\_а\_вед).

1. Ничипурук А.П., Розенфельд Е.В., ФММ **84**(6), 72, (1997).

### Синхротронное излучение в России и за рубежом

Пряничников С.В.

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: stepian@yandex.ru

В докладе будет дано краткое описание природы синхротронного излучения (СИ), его характеристики и свойства. Будет проведён обзор российских и зарубежных источников СИ, рабочих станций на их основе и возможностей для исследователя. Особое внимание будет уделено источнику ESRF, принципам подачи заявки и работы.

### Влияние кобальта на твердость и магнитные свойства мартенситно–стареющих сталей

#### Сташков А.Н.\*, Сомова В.М., Сажина Е.Ю., Сташкова Л.А., Огнева М.С.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: stashkov@imp.uran.ru

Мартенситно–стареющие стали широко используются для изготовления изделий ответственного назначения в силу сочетания хороших показателей пластичности и прочности, а также малой склонности к хрупкому разрушению. Контроль структурно–фазового состояния и механических свойств конструкций из мартенситно–стареющих сталей необходим на этапах изготовления и эксплуатации для прогнозирования их остаточного ресурса. Магнитные методы неразрушающего контроля являются перспективными для решения таких задач.

В данной работе изучены изменения магнитных и механических свойств мартенситно–стареющих сталей ЧС4ВИ (С – 0.01; Ni – 18.30; Co – 8%, Ti – 0.78; Mo – 3.33 вес.%) и ЧС5ВИ (С – 0.01; Ni – 18.30; Ti – 0.78; Mo – 3.33 вес. %) в зависимости от вариации температур старения. Образцы подвергали нормализации от 860°С, закалке от 820°С и старению в интервале температур от 100°С до 700°С с охлаждением на воздухе. Коэрцитивную силу  $H_c$ , остаточную магнитную индукцию  $B_r$ , индукцию насыщения  $B_s$  определяли согласно ГОСТ 15058–69. Параметр N' определяли согласно методике, описанной в [1]. Твердость НRС измеряли в нескольких точках по длине образца. Количество остаточного аустенита определяли рентгенодифракционным методом.

Установлено, что изменения магнитных свойств и твердости закаленных сталей ЧС4ВИ и ЧС5ВИ от температуры старения качественно похожи. В интервале температур старения 300–500°С наблюдается резкое повышение твердости, по-видимому, связанное с зонной стадией распада твердого раствора, выделением интерметаллидных фаз типа Fe<sub>2</sub>Mo и Ni<sub>3</sub>Ti. Максимум твердости наблюдается при нормальной технологической температуре старения 480–500°С и составляет 50 и 47 единиц HRC для сталей ЧС4ВИ и ЧС5ВИ соответственно. Небольшая разница обусловлена тем, что кобальт уменьшает растворимость молибдена в  $\alpha$ -железе и способствует упрочнению при старении. Разупрочнение исследованных сталей происходит при температурах старения, превышающих 500°С, что связано с резким возрастанием содержания остаточного аустенита в мартенситной матрице. В стали без кобальта ЧС5ВИ максимальное количество остаточного аустенита образуется при температуре старения 580°С, а в стали ЧС4ВИ — при 600–620°С, что подтверждается измерением магнитных параметров и данными рентгенофазового анализа.

Разработана двухпараметровая магнитная методика (по измерению коэрцитивной силы и остаточной индукции) контроля термообработки (старения), контроль фазового состава (содержания остаточного аустенита) возможен с применением в качестве параметров контроля индукции насыщения и параметра *N*'.

Дополнительно проведены исследования комплекса магнитных свойств на предварительно деформированных растяжением образцах из стали ЧС5ВИ с различным содержанием остаточного аустенита. Предложен метод контроля фазового состава и определения напряженнодеформированного состояния изделий.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Диагностика» №01201463329 (проект № 12–П–2–1031) при поддержке ОФИ УрО РАН (проект № 13–2–052–УВГ) и РФФИ (проект №12– 08–33098 мол\_а\_вед).

1. Сташков А.Н., Сомова В.М., Сажина Е.Ю., Сташкова Л.А., Ногин В.С., Ничипурук А.П., Дефектоскопия **12**, 41 (2013). Τεπλοφизика

# Магнитогипертермический эффект в системе взаимодействующих частиц в осциллирующем магнитном поле

Зубарев А.Ю $^{1,2}$ , Абубакр А.<br/>  $\Phi^{2*}$ 

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Университет Менуфия, Шибин-Эль-Ком, Египет \*e-mail: alibakrm@yahoo.com

Магнитная гипертермия является прогрессивным методом лечения раковых и других опухолевых заболеваний, наряду с традиционными методами лучевой и химиотерапии. Основная идея этого метода состоит в инъекции в организм магнитных наночастиц, которые могут адсорбироваться на опухолевых клетках. Внешнее осциллирующее магнитное поле нагревает частицы и, следовательно, клетки. Если температура опухолевых клеток достигает 42–45°С градусов, они погибают, чем и достигается терапевтический эффект.

Наиболее важным требованием для использования гипертермии в лечении рака является необходимость локально увеличить и поддерживать температуру в раковых клетках выше 42°C; температура здоровой ткани должна оставаться в безопасных пределах. Под общим понятием гипертермии можно различать собственно гипертермию (при нагреве больной ткани в диапазоне от 42 до 44°C) [1,2] и тепловую абляцию, если ее температура превышает 50°C [3]. Большинство теоретических работ по магнитной гипертермии имеют дело с системами одинаковых сферических ферромагнитных наночастиц. Однако в реальных системах эффекты межчастичного взаимодействия могут быть весьма существенными.

Мы представляем результаты математического моделирования тепловыделения в суспензии взаимодействующих ферромагнитных частиц в линейно поляризованном осциллирующем магнитом поле. Магнитное взаимодействие между этими частицами оценивается в парном приближении (учитывается взаимодействие только между двумя частицами).

Математически предлагаемая модель представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений динамики двух магнитно взаимодействующих частиц. Для максимального упрощения расчетов, во–первых, мы предполагаем, что пространственные положения этих частиц фиксированы, как это имеет место, когда частицы прикреплены к мембранам клеток, однако под действием переменного поля частицы могут вращаться.

Уравнения модели были решены численно. Была рассчитана интенсивность производства тепловой энергии в суспензии частиц в ньютоновской жидкости в зависимости от частоты приложенного поля. Расчеты показывают, что взаимодействие частиц приводит к существенному увеличению тепловыделения каждой из них. Полученные результаты могут быть важны для создания научной основы развития магнито–гипертермического метода терапии опухолевых заболеваний.

- 1. Safarik I., Safarikova M., Monat. fur Chemie 133, 737 (2002).
- 2. Wang B., Phd dissertation, University de Nice-Sophia Antipolis, France (2012).
- 3. Saiyed Z., Telang S., Ramchand C., BioMagnet. Res. & Tech. 1, 2 (2003).

### Ячейка для измерения поверхностного натяжения растворов водорода и его изотопов

Андбаева В.Н.\*, Хотиенкова М.Н.

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: andbaeva@mail.ru

В последние годы все больше внимания уделяется нетрадиционным видам энергетики, основными из которых можно выделить использование сжиженного природного газа (СПГ) и водородного топлива. Ввиду этого необходимым является изучение теплофизических свойств указанных веществ. Последние годы в нашем институте проводятся исследования теплофизических свойств растворов компонентов СПГ [1,3], а эксперименты с растворами водорода и его изотопов находятся на начальном этапе. Для этого создается экспериментальная установка для измерения поверхностного натяжения растворов водорода и его изотопов в интервале температур 4–44 К.

В наших опытах при измерении поверхностного натяжения жидкость поднималась внутри стеклянного капилляра [1]. В новой установке подъем жидкости будет осуществляться между двумя плоскопараллельными пластинами. Представленная работа направлена на проектирование модельной ячейки для пробных опытов. Высота подъема жидкости фиксируется по емкости конденсатора, измеряемой с помощью прецизионного измерителя LCR Agilent E4980A.

Для проведения пробных опытов были созданы две модельные ячейки. Каждая ячейка содержит три плоскопараллельные пластины размерами 20 × 15 × 2 (мм). Расстояние между первой и второй пластиной 1 мм, между второй и третьей 0.5 мм. В первой ячейке пластины выполнены из посеребрённых фотопластинок, во второй — из гетинакса. С помощью токопроводящего клея к пластинам из фотопластинок приклеены провода, к пластинам из гетинакса они припаяны. Для точного определения уровня поднятия исследуемой жидкости необходимо измерить емкости между пластинами конденсатора. На следующем этапе работы планируется проведение пробных опытов с разными диэлектриками (воздух, дистиллированная вода, глицерин).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №14–08–31391–мол\_а).

1. Baidakov V.G., Khotienkova M.N., Andbaeva V.N., Kaverin A.M., Fluid Phase Equilib. 301, 67 (2011).

- 2. Андбаева В.Н., Хотиенкова М.Н., Теплофизика и аэромеханика 20, 393 (2013).
- 3. Baidakov V.G., Kaverin A.M., Pankov A.S., The journal of physical chemistry 116, 20458 (2012).

# Теплоперенос в сильно неидеальных растворах при мощном локальном тепловыделении. Экспериментальный подход

Галкин Д.А.\*, Скрипов П.В.

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: dmitry.gall0@gmail.com

Практически важным и одновременно сложным для теоретического и экспериментального изучения объектом являются жидкие растворы с существенным отклонением свойств от идеальности. Неясен вклад факторов многокомпонентности и неидеальности в перенос тепла; не установлена взаимосвязь характеристик теплопереноса с другими макроскопическими характеристиками раствора, в частности с избыточными свойствами.

В квазистатических опытах по изучению теплообмена в растворах жидкостей разной природы при обычных значениях температуры  $(20 \div 80)^{\circ}$ С был обнаружен факт отрицательного отклонения концентрационной зависимости коэффициента теплопроводности растворов от аддитивного закона [1,2]. Л.П. Филиппов предположил, что появление дополнительного теплового сопротивления в растворах обусловлено рассеянием гиперакустических волн на флуктуациях концентрации, а одним из определяющих факторов является относительная разность плотностей чистых компонентов  $\Delta \rho / \bar{\rho}$ , где  $\bar{\rho}$  — среднее значение плотности [1]. Важно было проверить гипотезу Л.П. Филиппова в действительно широкой области изменения температуры и избыточного объема смешения. В работе [3] такая проверка была сделана на примере раствора алкан/перфторалкан методом управляемого импульсного нагрева [4]. Значение избыточного объема смешения при комнатной температуре достигало 5.0 см<sup>3</sup>/моль, температуры в импульсе — 700 К (при закритическом давлении). В силу методических трудностей эта работа не была доведена до логического завершения.

В докладе будут представлены результаты развития данного исследования. В дополнение будут обсуждены детали разработки установки для измерения теплопроводности растворов в относительном варианте метода управляемого импульсного нагрева проволочного зонда — термометра сопротивления.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №13–08–00428\_а) и Уральского отделения РАН (проект №12–2–1–011–АРКТИКА).

- 1. Филиппов Л.П., Кравчун С.Н., ЖФХ 56, 11 (1982).
- 2. Кравчун С.Н., ЖФХ **60**, 9 (1986).
- 3. Багинский А.В., Волосников Д.В., Скрипов П.В., Смотрицкий А.А., Теплофизика и аэромеханика **15**, 3 (2008).
- 4. Skripov P.V., Smotritskiy A.A., Starostin A.A., Shishkin A.V., J. Eng. Thermophys. 16, 3 (2007).

### О температурной зависимости поверхностной свободной энергии в области переохлажденных состояний однокомпонентной жидкости

Гришина К.А.

#### Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: kgrishina@mail.ru

Диметиловый эфир является перспективным источником энергии и широко используется в химической промышленности. Интерес к диметиловому эфиру обусловлен появлением нового доступного способа его получения и идеей использования в качестве моторного топлива. В связи с этим представляется полезным исследование его теплофизических свойств и, в частности, поверхностного натяжения. Такие данные необходимы при исследовании характера распыла топлива, процессов кипения и конденсации, капиллярных явлений.



Рис. 1. Поверхностное натяжение, поверхностная энергия  $U_s$  и поверхностная энтропия  $S_s$  диметилового эфира.

Данная работа посвящена измерению капиллярного поднятия и определению поверхностного натяжения диметилового эфира. Опыты проведены при температурах выше температуры тройной точки  $(T_{\rm t} = 131.66 \text{ K})$ , а также ниже этой температуры в области, где сосуществующие жидкость и газ метастабильны. Для достижения заданных температур последовательно использовалось несколько хладагентов: жидкий азот, спирт, вода. Измерения проводились дифференциальным методом капиллярного поднятия. В указанной области параметров состояния имеется только одна работа [1], в которой измерялось поверхностное натяжение диметилового эфира.

В результате эксперимента была измерена капиллярная постоянная диметилового

эфира в области температур от 120 до 370 К. С помощью полученных значений капиллярной постоянной и ортобарических плотностей, рассчитанных по уравнению из работы [2], было вычислено поверхностное натяжение. В результате обработки данных методом регрессионного анализа были получены аппроксимационные уравнения, описывающие температурные зависимости капиллярной постоянной и поверхностного натяжения.

Также были рассчитаны избыточная поверхностная энергия и энтропия диметилового эфира, представленные на рис. 1. Видно, что внутренняя энергия имеет максимум в области температуры 190 К, это соответствует точке перегиба на температурной зависимости поверхностного натяжения. В дальнейшем планируется провести измерения поверхностных свойств вблизи критической точки (*T* = 400.378 K).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 14–19–00567).

- 1. Soares V.A.M., Almedia B.J.V.S., Mc Lure I.A. et al., Fluid. Phase Equilib. 32(1), 9 (1986).
- 2. Wu J., Zhou Y., Lemmon E.W., J. Phys. Chem. Rev. Data 40(2), 23104 (2011).
# Исследование теплообмена многокомпонентных жидкостей при импульсном нагреве

Лукьянов К.В.\*, Котов А.Н., Старостин А.А.

#### Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: r.t.f@bk.ru

Изучение теплофизических свойств объекта (диэлектрической жидкости) позволяет предугадать поведение объекта в широком температурном диапазоне. Современные методы исследования диэлектрических жидкостей позволяют нагреть тонкие слои масла со скоростями до 10<sup>7</sup> К/с. Высокие скорости нагрева дают качественный скачок для достижения высокой чувствительности и оперативности устройств теплового контроля для выявления легкокипящих примесей. В качестве нагревателя используется тонкая (10–20 мкм) проволока из терморезистивного материала, например платины. Такой нагреватель одновременно является термометром сопротивления. Для определения значения быстро меняющегося сопротивления используются современные средства регистрации тока и напряжения в микросекундном диапазоне [1].

Экспериментальные исследования жидкостей с помощью проволочных нагревателей–зондов показали, что при импульсном нагреве тонкого слоя жидкости, прилегающего к зонду, достигается максимально высокая температура её относительно устойчивого состояния, связанная с термоустойчивостью жидкости на заданном интервале времени. Оказалось, что при таких высоких температурах поведение жидкости сильнее зависит от малых концентраций примеси, чем при более низких температурах [2].

Локальный импульсный нагрев термонеустойчивых жидкостей сопровождается релаксационными явлениями, зависящими от длительности и интенсивности нагрева. В области температур нарушения термической устойчивости наблюдается значительное влияние малых добавок летучих примесей на характер и продолжительность изменений температуры зонда от времени для разных образцов при заданном режиме нагрева. Полученные температурно–временные зависимости позволяют дать оценку наблюдаемым процессам путем расчета баланса тепла на проволочном зонде. Для оценки использовались среднемассовые значения температуры зонда, получаемые из расчета его сопротивления по результатам измерений напряжения разбаланса мостовой схемы с импульсным питанием постоянным током. Значение тока питания подбиралось для получения ярко выраженной картины релаксационного процесса. Полученные результаты свидетельствуют о наличии значительных плавных изменений теплового потока через поверхность зонда в многокомпонентную жидкость в узком интервале температур на участке времени в единицы миллисекунд. Наблюдаемое явление по своим признакам отличается от характерных резких изменений, связанных со спонтанным вскипанием.

1. Шангин В.В., Волосников Д.В., Сафонов В.Н., Старостин А.А., Скрипов П.В., Приборы 5, 6 (2012).

2. Skripov P.V., Puchinskis S.E., J. Appl. Polym. Sci. 59, 1659 (1996).

### Температура достижимого перегрева и предельные растяжения растворов этан–азот

### Панков А.С.

#### Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: artem\_pankov1987@mail.ru

Широкое и все возрастающее использование сжиженного природного газа (СПГ) в энергетике и других отраслях промышленности требует всестороннего изучения теплофизических процессов, происходящих с его участием. СПГ представляет собой многокомпонентный раствор, который при хранении, транспортировке и использовании часто оказывается в метастабильном (перегретом за линию насыщения) состоянии. Снятие перегрева может происходить путем спонтанного вскипания. В представленной работе изучается вскипание растворов компонентов сжиженного природного газа — этана и азота.

Для исследования кинетики вскипания раствора использовались методы измерения времени жизни и непрерывного понижения давления. Жидкость перегревалась в стеклянной ячейке объемом  $V \approx 88 \text{ мм}^3$ . Заход в метастабильную область осуществлялся снижением давления ниже давления фазового равновесия. В первом методе измерялось время до вскипания жидкости после резкого сброса давления до заданного значения *p*. Во втором — давление понижалось со скоростью 10–100 кПа/с и фиксировалось в момент вскипания жидкости. Вскипание отождествлялось с появлением в жидкости первого жизнеспособного зародыша. Это предположение оправдано при малых объемах жидкости и достаточно больших ее перегревах.

Исследуемый раствор готовился непосредственно в измерительной ячейке. Содержание азота *x* в растворе определялось по давлению насыщенных паров до начала эксперимента и контролировалось в процессе измерений. Экспериментальная установка и методика проведения опытов подробно описаны в [1].

Времена жизни измерены при давлениях p = 1.0, 1.6 МПа и концентрациях азота в растворе x = 0.5 и 1.5 моль%. Измерения предельных растяжений жидкости методом непрерывного понижения давления проведены по изотермам T = 266.0, 270.0, 276.0 К для раствора с концентрацией азота x = 0.5 моль% и T = 260.0, 266.0, 270.0 и 276.0 К для раствора с x = 1.5 моль%.

Растворение азота в этане приводит к уменьшению времени ожидания вскипания т и снижению температуры достижимого перегрева  $T_n$ . Так, температура достижимого перегрева раствора с содержанием азота x = 0.5 моль% при частоте зародышеобразования  $J = 10^7 \text{ м}^{-3} \text{c}^{-1}$  и давлении 1.0 МПа составила 272.7 К, что на 1.1 К ниже значения  $T_n$  чистого этана. Для данного раствора при p = 1.6 МПа получено  $T_n = 277.0$  К. Это значение ниже  $T_n$  чистого этана на 1.2 К. Раствор с содержанием азота x = 1.5 моль% при давлении 1.0 МПа перегревается только до 270.7 К, при p = 1.6 МПа — до 274.8 К. Эти значения ниже перегревов чистого этана на 3.0 и 3.4 К соответственно. При частотах зародышеобразования  $J = (2.1-2.3) \cdot 10^6 \text{ м}^{-3} \text{c}^{-1}$  (область так называемого «плато» на температурной зависимости lg т и lg J) значения J и т практически не зависят от температуры, давления и состава раствора.

Максимальная глубина захода в метастабильную область увеличивается с понижением температуры и составляет 0.8–1.6 МПа. Предельные растяжения жидкости, полученные методом непрерывного понижения давления, близки к предельным пересыщениям, достигнутым при измерениях времени ожидания вскипания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты №№ 13–08–96039–р\_Урал\_а, 14–08– 31391–мол\_а), Правительства Свердловской области.

1. Байдаков В.Г., Перегрев криогенных жидкостей, Екатеринбург: УрО РАН, 264 (1995).

# Изучение температурной зависимости теплофизических свойств полимерных материалов методом управляемого импульсного нагрева

Старостин А.А., Ямпольский А.Д., Смотрицкий А.А.\*

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: smotritskiy@bk.ru

Теплофизические свойства веществ обычно измеряются в абсолютно устойчивых состояниях. В случае экстремальных условий применения важно иметь характеристику устойчивости материала к интенсивному нагреву. Экспериментально установлено, что сокращение времени теплового воздействия на образец значительно увеличивает допустимую температуру нагрева полимерных композиций [1]. По причине очевидных экспериментальных сложностей практически отсутствуют данные о тепловых свойствах полимерных материалов в импульсно перегретом состоянии относительно температуры квазистатического терморазрушения. В этой связи нами развиваются варианты метода импульсного нагрева зонда, имплантированного в диэлектрические полимерные материалы, и метода численного моделирования параметров теплообмена на основе результатов опыта [2]. Для воспроизведения различных режимов импульсного нагрева разработаны устройства цифрового синтеза функции нагрева и записи температурного сигнала. В опыте регистрируются электрическая мощность P(t), выделяемая в зонде для выполнения заданного температурного режима, и изменение температуры T(t), вычисляемое по изменению сопротивления зонда во время опыта. Возможно построение процедуры идентификации системы по параметрам теплообмена с учетом зависимости свойств от температуры путем сравнения численного решения прямой задачи и данных опыта.

- 1. Волосников Д.В., Ефремов В.П., Скрипов П.В., Старостин А.А, Шишкин А.В., Теплофизика высоких температур **44**(3), 465–471 (2006).
- 2. Rutin S.B., Smotritskiy A.A., Starostin A.A., Okulovsky Y.S., Skripov P.V., Int. J. Heat Mass Transfer **62**(1), 135–141 (2013).

## Активационный барьер кристаллизации: молекулярно–динамический эксперимент

### Бобров К.С., Типеев А.О.\*

#### Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: tipeeff@ya.ru

В молекулярно–динамическом эксперименте исследован энергетический барьер кристаллизации метастабильной жидкости в областях положительного и отрицательного давлений. Расчеты проведены в микроканоническом ансамбле при трех значениях приведенных температур  $T^* = k_{\rm B}T/\epsilon = 0.4, 0.55, 0.85$  ( $k_{\rm B}$  — постоянная Больцмана,  $\epsilon$  — энергетический параметр потенциала взаимодействия).

Исследуемая система содержала 32000 леннард–джонсовских (ЛД) частиц с параметрами потенциала межчастичного взаимодействия для аргона. Частицы располагались в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Исходная конфигурация — стабильная жидкость. Заход в метастабильную область осуществлялся вдоль изотермы путем линейного уменьшения размеров ячейки. На каждой изотерме исследовалось до 10 метастабильных состояний. Для каждого изучаемого термодинамического состояния получено от 50 до 200 событий плавления.

С использованием локального параметра порядка Q6 выделены кристаллические кластеры в переохлажденной жидкости. В рамках формализма среднего времени первого перехода определен размер критического зародыша, работа его образования и восстановлен вид энергетического барьера кристаллизации.

Полученные в компьютерном эксперименте данные по работе образования критического кристаллика сопоставляются с расчетами по классической теории нуклеации.

Проведены пробные расчеты величины активационного барьера кристаллизации методом метадинамики.

Молекулярно–динамические параллельные вычисления проведены в программе LAMMPS 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 РФФИ (проект № 14–08–31761) и Программы УрО РАН П1 (проект № 12–П–2–1008).

### Поверхностное натяжение раствора пропан–гелий

<u>Хотиенкова М.Н.</u>\*, Гришина К.А.

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: mkhotienkova@vandex.ru

В данной работе представлены результаты экспериментального определения σ — поверхностного натяжения компонентов сжиженного природного газа — раствора пропан–гелий. Поверхностное натяжение определялось по данным для капиллярной постоянной:

$$\sigma = 0.5a^2 g \left( \rho_L - \rho_V \right), \tag{1}$$

где *a*<sup>2</sup> — капиллярная постоянная, *g* — ускорение свободного падения в месте проведения эксперимента, *ρ*<sub>*L*</sub>, *ρ*<sub>*V*</sub> — ортобарические плотности жидкой и паровой фаз.

В опытах использовался дифференциальный вариант метода капиллярного поднятия [1]. Эксперименты проведены в интервале температур 120–270 К в диапазоне давлений от давления насыщения чистого пропана до 4 МПа. Увеличение давления проводилось путём добавления порции гелия. Концентрации растворов определялись по экспериментальным данным [2]. В связи с отсутствием в литературе уравнения состояния и данных по ортобарическим плотностям значения  $\rho_L$  и  $\rho_V$  определялись по методу, предложенному в работе [3]. Погрешность измерения  $a^2$  составила 1–1.5 %,  $\sigma$  — 2–2.5 %.



Рис. 1. Концентрационная зависимость капиллярной постоянной раствора пропан-гелий при температурах: 1 — T = 180, 2 - 210, 3 - 270 К.



Рис. 2. Концентрационная зависимость поверхностного натяжения раствора пропан–гелий при температурах: 1 — T = 180, 2 - 210, 3 - 270 К.

На рисунках 1 и 2 представлены концентрационные зависимости капиллярной постоянной и поверхностного натяжения раствора пропан–гелий при трёх температурах. Видно, что добавление гелия практически не меняет значение σ раствора.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ (проект № 13-08-96039-р\_Урал\_а) и Правительства Свердловской области.

- 1. Байдаков В.Г., Межфазная граница простых классических и квантовых жидкостей. Екатеринбург: УИФ «Наука» (1994).
- 2. Schindler D.L., Swift G.W., Kurata F. 45(11), 205 (1966).
- 3. Благой Ю.П., Исследование термодинамических свойств ожиженных газов и их растворов: Дисс. ...докт. физ.-мат. наук. Харьков: ФТИНТ АН УССР (1970).

# Определение концентраций и ортобарических плотностей растворов метан–азот–гелий в интервале температур 105–160 К

<u>Хотиенкова М.Н.</u>\*, Андбаева В.Н., Гришина К.А.

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: mkhotienkova@yandex.ru

Эксперименты по определению капиллярной постоянной растворов метан–азот–гелий проведены в интервале температур 105 — 160 К при различных концентрациях «базового» раствора метан–азот в интервале давлений до 4 МПа [1].

В данной работе представлены результаты определения ортобарических плотностей и состава раствора, необходимые для расчета поверхностного натяжения. Концентрация азота в жидкой и паровой фазе «базового» раствора метан–азот определялась по модифицированному уравнению состояния Леммона–Якобсена [2]. Модификация заключалась в замене уравнений состояния чистых веществ на уравнения, разработанные в Госстандарте СССР [3,4], которые позволяют описать не только стабильные, но и метастабильные состояния. Концентрация гелия в растворе определялась по экспериментальным данным [5,6].

Для определения ортобарических плотностей использовался метод аддитивного приближения. По критической температуре раствора метан–азот  $T_{\rm C}$  находилась приведённая температура  $\tau = T_{\rm C}/T$ , на основании которой рассчитывались соответственные температуры растворов метан–гелий  $T_{\rm CH_4-He} = \tau \cdot T_{\rm C_{CH_4}}$  и азот–гелий  $T_{\rm N_2-He} = \tau \cdot T_{\rm C_{N_2}}$ . При данных температурах находились разности плотностей в растворах метан–гелий [6] и азот–гелий [7]. Итоговая разность плотностей трёхкомпонентного раствора находилась в линейном приближении пропорционально концентрации азота в нём.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ (проект №14–08–31391 мол\_а) и программы совместных научных исследований УрО и СО РАН (проект №12–С–2–1001).

- 1. Гришина К.А., Андбаева В.Н., Хотиенкова М.Н., XIV Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества, 178 (2013).
- 2. Lemmon E.W., Jacobsen R.T., Int. J. Thermophys. 20, 825 (1999).
- 3. Сычёв В.В., Вассерман А.А., Загорученко В.А. и др., Термодинамические свойства метана, М.: Издательство стандартов (1979).
- 4. Сычёв В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д. и др., Термодинамические свойства азота, М.: Издательство стандартов (1977).
- 5. Knapp H., Zeck S., Langhorst R., Vapor–liquid equilibria for mixtures of low boiling substances (Ternary systems) (1989).
- 6. Shulze W., Fluid phase equilibria 134, 213 (1997).
- 7. Baidakov V.G., Grishina K.A., Fluid phase equilibria 354, 245 (2013).
- 8. Байдаков В.Г., Каверин А.М., Журнал физ. химии 78(6) 1150 (2004).

# Электрофизика

### Динамика расплавленного металла в катодном пятне вакуумной дуги

<u>Гашков М.А.</u><sup>1\*</sup>, Зубарев Н.М.<sup>1,2</sup>, Кочурин Е.А.<sup>1</sup>

### <sup>1</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия \*e-mail: gashkov@iep.uran.ru

В вакуумном дуговом разряде значительную роль играют процессы, происходящие на катоде и в прикатодной области [1]. При горении дуги на катоде возникают микрократеры. Их формирование обусловлено вытеснением расплавленного джоулевым разогревом металла давлением плазмы. Из снимков поверхности катодов [1–3] видно, что на границе кратеров формируются системы жидкометаллических струй. Согласно [1], эти микроструи играют ключевую роль в самоподдержании дугового разряда, обеспечивая условия для инициирования взрывной электронной эмиссии. Это определяет необходимость адекватного описания гидродинамических процессов, приводящих к формированию струй. Целью данной работы является описание динамики жидкого металла катодного пятна вакуумной дуги.

Вытеснение расплавленного металла из микрократеров, формирующихся на катодном пятне вакуумной дуги, рассматривалось в рамках уравнений потенциального течения идеальной жидкости со свободной поверхностью. В приближении малости глубины слоя жидкости (приближение мелкой воды) были получены уравнения на движение непосредственно границы под воздействием внешнего давления для случая осевой симметрии задачи. В работе численно решались эти модельные уравнения при различных значениях давления плазменного факела применительно к медному катоду.

Проведённое моделирование движения жидкости показало, что при достаточно большом давлении плазмы на границе формирующегося кратера образуется жидкий вал. В ситуации, когда высота вала превышает его толщину, возникают условия для развития имеющей капиллярную природу неустойчивости Рэлея–Плато. Эта неустойчивость приводит к формированию системы струй на гребне вала и, как следствие, нарушению осевой симметрии задачи. Этот процесс сходен с процессом формирования так называемой короны, образующейся при падении капли жидкости на плоскую твёрдую смоченную поверхность [4]. Эта аналогия обусловлена тем обстоятельством, что несмотря на отличающуюся на порядки их характерные пространственные и временные масштабы, такие важные гидродинамические параметры, как числа Вебера и Рейнольдса, для обеих ситуаций оказываются близкими. Полученные результаты сопоставлялись с известными экспериментальными данными [2,3]. Продемонстрировано, что характерные времена формирования струй, а также их характерный размер находятся в согласии с результатами указанных работ.

Данная работа выполнялась в рамках программы Президиума РАН №29 при финансовой поддерж-ке РФФИ (гранты №№ 14–08–00235 и 14–08–31194).

- 1. Месяц Г.А., УФН **165**(6), 601 (1995).
- 2. Pushkarev V.F., Murzakaev A.M., J. Phys. D: Appl. Phys. 23, 26 (1990).
- 3. Mesyats A., Bochkarev M.B., Applied physics letters 104(1), 184101 (2014).
- 4. Cossali G.E., Coghe A., Marengo M., Experiment in Fluids 22, 463 (1997).

### Получение и обработка алюминиевого металломатричного композита методами сильноточной электроники

Заяц С.В.<sup>1</sup>\*, Кайгородов А.С.<sup>1</sup>, Паранин С.Н.<sup>1</sup>, Томило В.А.<sup>2</sup>, Кривонос Ю.И.<sup>2</sup>, Кебец А.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Физико-технический институт НАН Беларуси, Минск, Беларусь \*e-mail: seriyoqa@mail.ru

Металломатричные композиты (ММК) на основе алюминия, упрочненного собственным оксидом, обладают более высокими прочностными характеристиками по сравнению с чистым алюминием и его сплавами при незначительном увеличении удельного веса. Упрочняющие частицы оксида алюминия, распределенные в объеме металлической матрицы, способствуют сохранению механических свойств композита Al–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в широком диапазоне температур. При переходе структуры в наномасштаб свойства материалов, как правило, значительно улучшаются.

Для получения алюминиевого наноструктурного ММК в работе использовался ряд методов сильноточной электроники. Так, методом электровзрыва проволоки (ИЭФ УрО РАН) была получена серия нанопорошков пассивированного (металлическое ядро, покрытое пленкой Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) алюминия с содержанием оксида: 6, 9, 17 и 24 вес.%. По данным рентгенофазового анализа полученные порошки в общем случае содержат три фазы: кристаллический алюминий, оксид алюминия в виде γ–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, а также оксид алюминия в аморфном состоянии, который находится в оболочках частиц Al.

Последующим одноосным магнитно–импульсным прессованием (МИП) при давлении 1.4 ГПа и температурах 20, 250 и 400°С были получены образцы композита всех четырех составов. Для сравнения со статическим компактированием на прессе ПРГ–70 получена аналогичная серия образцов при комнатной температуре. Прессование проводилось в разборных пресс–формах диаметром 8 мм. Высота образцов варьировалась в диапазоне 6–9 мм. Относительная плотность образцов после МИП составила 0.84–0.99, в случае статического прессования плотность образцов ниже на 4-6%.

Для первичного изучения механических характеристик спрессованных ММК были выбраны два состава значительно отличающихся между собой — 9% и 24% упрочняющей оксидной фазы. Оказалось, что обработка таких составов магнитно–импульсным давлением амплитудой 1.4 ГПа приводит к практически одинаковым, в пределах ошибки измерения, значениям микротвердости на уровне 2.1–2.3 ГПа.

Применение к полученным компактам метода электроимпульсного спекания (ЭИС) позволяет создать более прочные межзеренные контакты во всем объеме образца. При пропускании импульсного электрического тока через порошковую металлическую заготовку (ФТИ НАН Беларуси) джоулево энерговыделение осуществляется преимущественно на границах зерен, ориентированных перпендикулярно направлению тока, как местах, имеющих более высокое сопротивление. Это позволяет повысить эффективность консолидирования материала. При необходимости получения пористого тела из таких композитов данная стадия особенно актуальна, т.к. не происходит значительного роста зерна с увеличением механической прочности.

Работа выполнена при финансовой поддержке: УрО РАН (проект № 12–У–2–1029), РФФИ (проект № 13–08–00883), РФФИ (проект № 14–08–90043) совместно с БРФФИ (договор № Т14Р–176 от 23.05.2014).

### Исследование кольцевых взрывоэмиссионных катодов

<u>Комарский А.А.</u><sup>1,2\*</sup>, Чепусов А.С.<sup>2</sup>, Кузнецов В.Л.<sup>2</sup>, Корженевский С.Р.<sup>2</sup>, Бессонова В.А.<sup>2</sup>, Криницин В.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: aakomarskiy@gmail.com

В настоящее время существует необходимость использования компактных источников рентгеновского излучения для мобильных медицинских аппаратов и приборов для дефектоскопии. Данное исследование посвящено изучению свойств импульсных взрывоэмиссионых [1] катодов для рентгеновских трубок. Представлены результаты исследования трех видов кольцевых взрывоэмиссионных катодов: металлокерамического, металлокерамического с прорезями (гребенчатого типа) и углеродо– керамического. Углеродо–керамический катод изготовлен из промышленного графита марки МПГ– 7. Обращение к данному материалу вызвано его особыми автоэмиссионными свойствами и устойчивостью к ионной бомбардировке, что было изучено нами ранее [2].

В качестве источника высоковольтных импульсов использован генератор с твердотельным прерывателем тока (SOS диодом), который имеет следующие параметры: длительность импульса напряжения на полувысоте около 20 нс, амплитуда напряжения в импульсе до 150 кВ, частота следования импульсов до 200 Гц.

Получены осциллограммы токов и напряжений, соответствующие разной скорости нарастания ускоряющего напряжения, подводимого к аноду рентгеновской трубки. Длительность импульса тока на полувысоте для кольцевого углеродо–керамического катода существенно ниже, чем для остальных. Установлено, что мощность дозы облучения для углеродо–керамического катода существенно выше, чем у двух других. В табл. 1 приведены характеристики трех видов исследованных катодов.

	Амплитуда	Напряжение	Длительность	Скорость	Мощность			
Катод	имп. напр,	старта	импульса	нарастания	дозы,			
	кВ	эмиссии, кВ	тока, нс	имп. напр. кВ/нс	мкЗв/ч			
Гребенчатый	99.1	88.0	13.1	6.83	21			
Металло-	140.6	140.6	7.75	9.41	18			
керамический								
Углеродо-	134.2	100.7	5.15	8.59	34			
керамический								

Таблица 1. Характеристики исследуемых катодов.

Углеродо–керамический катод в перспективе будет применен для портативных импульсных частотных рентгеновских аппаратов, которые позволяют снизить дозу облучения для пациентов почти на порядок [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке УрФУ в рамках реализации Программы развития УрФУ для победителей конкурса «Молодые ученые УрФУ», а также при поддержке гранта РФФИ №14-08-31243 мол\_а.

1. Mesyats G.A., Explosive Electron Emission, URO Press (1998).

2. Chepusov A., Cholakh S., Phys. Status Solidi C 10, 614–18 (2013).

3. Komarskiy A.A., Chepusov A.S. et. al., Journal of Biosciences and Medicines 2, 17–21(2014).

# Формирование областей с высокой плотностью энергии электрического поля на свободной поверхности жидкого диэлектрика в результате взаимодействия нелинейных волн

Кочурин Е.А.<sup>1</sup>\*, Зубарев Н.М.<sup>1,2</sup>, Гашков М.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия \*e-mail: kochurin@iep.uran.ru

Известно, что на поверхности жидкости во внешнем электрическом поле, направленном касательно к невозмущенной границе жидкости, могут распространяться волны, скорость которых пропорциональна напряженности поля [1]. В случае, если диэлектрическая проницаемость жидкости достаточна велика (много больше единицы), то нелинейные волны вдоль границы такой жидкости могут распространяться без искажений в направлении или против направления внешнего поля [2]. Нелинейность в данном случае оказывает влияние только на взаимодействие встречных волн. Целью настоящей работы является теоретическое исследование процесса взаимодействия сильно– нелинейных волн на границе непроводящей жидкости с высокой проницаемостью во внешнем тангенциальном электрическом поле.

Для численного описания эволюции поверхности жидкости нами был выбран метод динамических конформных преобразований, использованный в работе [3] для описания динамики волн на поверхности жидкости под действием силы тяжести. В недавней работе [4] нам удалось обобщить данный метод для задачи описания поверхности жидкости, находящейся в электрическом поле. Суть метода заключается в преобразовании области, занимаемой жидкостью, в параметрическую полуплоскость новых вспомогательных переменных. В новых (конформных) координатах уравнения Лапласа для потенциалов скорости и электрического поля решаются аналитически и, как следствие, исходная 2+1–мерная задача сводится к 1+1–мерной.

Проведенное моделирование показало, что в результате взаимодействия форма волн меняется. Наблюдаемый эффект при однократном столкновении является относительно слабым; деформация пропорциональна четвертой степени амплитуды взаимодействующих волн. Многократное взаимодействие волн приводит к формированию на границе заострений (областей со значительной плотностью энергии электрического поля). В точках наибольшего заострения напряженность поля увеличивается в несколько раз, что может привести к пробою жидкого диэлектрика.

Данная работа выполнялась в рамках программы Президиума РАН «Фундаментальные проблемы нелинейной динамики в математических и физических науках», при финансовой поддержке Правительства Свердловской области и РФФИ (гранты №№ 13–08–96010 и 14–08–31194), а также фонда «Династия».

1. Melcher J. R., Phys. Fluids 11, 12 (1968).

- 2. Zubarev N.M, Physics Letters A 33, 284–288 (2004).
- 3. Zakharov V.E., Dyachenko A.I., Vasilyev O.A., European Journal of Mechanics B 21, 283-291 (2002).
- 4. Зубарев Н.М., Кочурин Е.А., Письма в ЖЭТФ **99**(11), 729–734 (2014).

#### Синтез наночастиц оксидов металлов в канале ускорителя плазмы

Портнов Д.С.\*, Багазеев А.В., Бекетов И.В., Азаркевич Е.И., Медведев А.И., Мурзакаев А.М.

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: dimitrii-89pishi@mail.ru

Развитие технологических применений наноразмерных частиц в виде аэрозолей стимулирует целенаправленную разработку и совершенствование методов их получения. В связи с этим возникает необходимость в создании генераторов для получения аэрозолей, состоящих из наночастиц с заданной концентрацией и необходимым средним размером. Такие устройства могут быть использованы для калибровки анализаторов аэрозолей, испытаний газовых фильтров тонкой очистки и других применений. Одним из перспективных типов генераторов, подходящих для решения этой задачи, является импульсный ускоритель плазмы, в котором наночастицы материала образуются в результате эрозии электродов и выводятся из канала ускорителя с высокими скоростями. Таким образом, целью данной работы являлась разработка и создание генератора аэрозолей наночастиц, позволяющего получать аэрозоли с регулируемыми концентрацией и дисперсностью частиц, исследование характеристик аэрозолей и закономерностей их получения электроискровым методом.

В ходе настоящей работы были изготовлены и опробованы ускоритель плазмы коаксиального типа и установка на его основе для получения аэрозолей оксидов. Подача энергии к ускорителю осуществлялась от генератора импульсных токов на основе емкостного накопителя. Емкость конденсаторной батареи изменялась в диапазоне от 0.1 до 0.25 мкФ, напряжение заряда 10-25 кВ, частота следования импульсов 0.1–10 Гц. Исследованы условия получения наночастиц оксидов Al и Fe. Синтез аэрозольных частиц проводили в воздушном потоке при атмосферном давлении. Методами просвечивающей электронной микроскопии (JEOL JEM 2100), рентгенофазового (D8 DISCOVER) и элементного анализа (СТАРТ-001) исследованы дисперсный, фазовый и элементный состав синтезированных аэрозолей. Проведены измерения концентрации и распределения частиц по размерам с помощью диффузионного аэрозольного спектрометра ДАС 2702 (ООО «АэроНаноТех»), подключенного к газовой системе установки. По данным электронной микроскопии было обнаружено, что наночастицы аэрозолей, состоят из агломератов со средним размером, изменяющимся в диапазоне от 10 до 50 нм, и концентрацией в потоке газа, изменяющейся от 2 до  $5 \cdot 10^6$  см $^{-3}$  в зависимости от условий разряда. В свою очередь, агломераты состоят из более мелких (первичных) наночастиц, размер которых варьируется в диапазоне от 1 до 10 нм. Получены зависимости влияния параметров разряда (заряд накопителя, частота и длительность разрядных импульсов) на концентрацию и средний размер частиц аэрозолей оксидов алюминия и железа. Обнаружено, что увеличение энергии емкостного накопителя и частоты разрядов для обоих материалов приводит к увеличению концентрации получаемых аэрозолей и среднего размера составляющих их частиц. Показано, что уменьшение периода колебаний разрядного контура (с 1.7 мкс до 0.46 мкс) приводит к уменьшению среднего размера первичных частиц и смещению их распределений в область меньших размеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 12–08–01155–а.

# Термодинамическое описание жидкого металла при интенсивном импульсном энерговводе

#### Волков Н.Б., <u>Чингина Е.А.</u>\*

#### Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: zhenya@iep.uran.ru

Проблема построения уравнений состояния металлов является общей для всех направлений физики высоких плотностей энергии [1]. Знание термодинамических свойств и уравнений состояний металлов при высоких давлениях и температурах имеет целый ряд важных практических приложений. К их числу следует отнести воздействия на конденсированные среды концентрированных потоков лазерного излучения, пучков заряженных и нейтральных частиц, физики ударных волн, проектирование мощных энергетических установок. При этом уравнение состояния широко используется в программах численного моделирования процессов мощного импульсного воздействия [2].

При построении уравнения состояния жидкого металла мы используем предположение, высказанное Я.И. Френкелем [3], о том, что структура жидкости вблизи кривой плавления близка к структуре твердого тела на кривой плавления, а разрушение кристаллической решетки (дальнего порядка в ней) происходит лавинообразно в результате потери ею устойчивости. Жидкий металл представили в виде бинарной смеси кластеров и идеального газа, сосредоточенного в межкластерных границах. При этом колебательные степени свободы определяются структурой и числом частиц в кластере, а поступательные — газовой компонентой жидкости. В первом приближении можно считать, что плотность вещества в кластерах близка к твердотельной на кривой плавления.

Свободную энергию жидкого металла в нашей модели представляем в виде суммы вкладов кластеров, возбужденного электронного и идеального газов. В силу отмеченной близости жидкого состояния вблизи кривой плавления к твердотельному состоянию, кластерную часть свободной энергии описываем свободной энергией твердого тела [4] с учетом образующихся в твердом теле вблизи кривой плавления дефектов (вакансий, пар «вакансия-междузельный атом»). Для описания дефектов модифицируем теорию характеристической функции Эйринга [5]. Суть модификации заключается в использовании для описания колебательного спектра кластеров не эйнштейновской модели, как это принято у Эйринга, а модели Дебая или же их комбинации. В свободную энергию жидкого металла входят два свободных параметра, определяющиеся из требования равенства теоретических и экспериментальных значений скачков объема и энтропии на кривой плавления при атмосферном давлении. Определены параметры потенциала Гиббса для натрия. Построены однофазная и двухфазная кривые плавления в сравнении с экспериментальными данными.

Данная работа поддержана РФФИ (проекты №№ 13–08–00266–а и 14–08–31024–мол\_а) и ФАНО в рамках Программы фундаментальных исследований Президиума РАН (проект УрО РАН № 12–П–1005).

- 1. Фортов В.Е., Уравнения состояния вещества от идеального газа до кварк–глюонной плазмы. М.: Физматлит (2012).
- 2. Koval N., Krivobokov V., Известия вузов Физика, 55(12/2) (2012).
- 3. Frenkel J.I., Kinetic theory of liquids. Oxford: Clarendon Press (1946).
- 4. Volkov N.B., Chingina E.A. and Yalovets A.P., Известия вузов Физика, 55(10/3), 438 (2012).
- 5. Глестон С., Лейдлер К., Эйринг Г., Теория абсолютных скоростей реакций, Москва: ИЛ (1948).

Наноматериалы

# Структурные изменения поверхности поликристаллического алюминия

#### Алероев М.А.\*, Крымшокалова Д.А., Ашхотова И.Б., Ашхотов О.Г.

#### Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Нальчик, Россия \*e-mail: oandi@rambler.ru

Известно [1], что контакт металлов с ионами инертных газов в зависимости от режима облучения может приводить в одних случаях к эрозии поверхности, а в других — к ее сглаживанию (ионной полировке). В литературе почти нет информации о начальном состоянии поверхности, о процессах в ходе модификации при небольших плотностях ионных токов и невысоких дозах облучения. Отсутствует информация о структурной модификации поверхности, когда на исходной поверхности присутствуют оксидные слои.

На наш взгляд, было бы интересно выяснить, как влияют на морфологию поверхности поликристаллических металлов ионы инертных газов, когда на поверхности присутствует оксидный слой. По этой причине целью настоящей работы было изучение рельефа поверхности поликристаллического алюминия с естественным оксидным слоем при облучении ионами аргона.

Образец для исследования представлял собой пластину 10 × 10 × 0.5 мм из полированного (паста ГОИ и алмазная паста ACM12/1 ПВМХ) поликристаллического алюминия чистотой 99.995 ат. %. Контроль за состоянием поверхности в процессе рельефообразования проводили на комбинированном спектрометре с энергоанализатором заряженных частиц «цилиндрическое зеркало» [2], который позволял использовать в экспериментах два метода — электронную Оже-спектроскопию (ЭОС) и спектроскопию характеристических потерь энергии первичными электронами (СХПЭЭ). Наноморфология поверхности образца изучалась с помощью сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) Интегра Аура (НТ МДТ). Поле сканирования было 10 × 10 мкм и более.

В результате проведенных исследований было установлено, что на необработанной ионным пучком поверхности алюминия с естественным оксидным покрытием средняя арифметическая шероховатость была 20 нм, а после длительной ионной обработки — 270 нм.

Облучение поверхности однократно ионизированными атомами аргона с энергией 500 эВ не приводило к стравливанию оксидного слоя [3], а на Оже–спектрах помимо пиков алюминия и кислорода появлялись пики аргона и азота, причем низкоэнергетический пик Al занимал положение 61.1 эВ, обусловленный, возможно, междуатомным электронным переходом AlNAl —  $L_{2.3}L_{2.3}$ V. Поэтому полученный результат мы объясняем накоплением бомбардирующих ионов в междоузельных пустотах поверхности, в результате чего образуется пересыщенный твердый раствор из атомов мишени и бомбардирующих ионов аргона и азота, захватываемого ионным пучком из остаточного газа рабочей камеры спектрометра. По-видимому, длительная бомбардировка ионами аргона в наших экспериментальных условиях приводит к комбинированию Al,  $Al_2O_3$  и AlN, из которых формировался слой оксинитрида  $(AlN)_x(Al_2O_3)_{1-x}$ . Локальный анализ РФЭС показал, что после ионной бомбардировки химический состав на выступах и сглаженных участках поверхности Al был одинаковым.

1. Беграмбеков Л.Б., Итоги науки и техники. Серия «Пучки заряженных частиц» 7, 4 (1993).

2. Ashkhotov O.G., Zdravomislov M.V., Surf. sci. 339, 279 (1995).

3. Grepstad J.K., Gartland P.O., Slagsvold B.J., Surf. Sci. 57, 348 (1976).

# Влияние β–облучения на люминесцентные свойства субмикронной керамики оксида алюминия

Ананченко Д.В.\*, Киряков А.Н., Звонарев С.В., Кортов В.С.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: ananchenko.daria@mail.ru

Оптические и люминесцентные свойства субмикронных материалов, потенциал практического применения которых велик, интенсивно изучаются в связи с необходимостью создания на их основе новых функциональных материалов. Перспективной сферой применения субмикронных люминофоров, в частности оксида алюминия, является высокодозная дозиметрия на основе термолюминесцентных детекторов.

Субмикронная керамика Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> синтезирована при отжиге компактов в вакуумной электропечи при температурах 1500–1700°С и времени отжига 15–60 мин. Компакты изготовлены статическим прессованием нанопорошка  $\alpha$ –Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с размером частиц 50–70 нм под давлением 1 т/см<sup>3</sup>. Данные сканирующей электронной микроскопии показали, что керамика состояла преимущественно из частиц размером 50–200 нм (67%) и агломератов со средним размером 750 нм (33%). Измерение термолюминесценции (ТЛ) выполнено на экспериментальном стенде в интервале температур 320–670 К со скоростью нагрева 2 К/с. Предварительно образцы облучались дозами 16 мГр–85 Гр источником  $\beta$ –излучения Y<sup>90</sup>/Sr<sup>90</sup>. Регистрация спектров импульсной катодолюминесценции (ИКЛ) осуществлялась при облучении электронным пучком длительностью 2 нс с максимальной энергией электронов 130 ± 10 кэВ.



Рис. 1. Спектр ИКЛ субмикронной керамики  $Al_2O_3$ , синтезированной при  $T = 1500^{\circ}$ С, 1 час (1);  $T = 1600^{\circ}$ С, 1 час (2);  $T = 1700^{\circ}$ С, 30 мин (3).



Рис. 2. Кривые ТЛ субмикронной керамики  $Al_2O_3$ , отожженной при  $T = 1600^{\circ}C$  (1 час), после  $\beta$ -облучения дозами 3.84 Гр (1), 11.52 Гр (2) и 40 Гр (3).

В ходе проведенных исследований установлено, что наибольшая интенсивность ИКЛ субмикронной керамики  $Al_2O_3$  в полосе 420 нм (F-центры) соответствует температуре отжига 1600°С. В спектрах образцов, отожженных при T = 1600°С (1 час) и 1700°С (30 мин), ярко выражена полоса свечения 540 нм (рис. 1), соответствующая свечению  $F_2^{2+}$ -центров. Кривая ТЛ субмикронного  $Al_2O_3$  имеет три пика: пик при T = 350 К, соответствующий мелким ловушкам, дозиметрический пик при T = 460 К и пик при T = 405 К, формирующийся при дозах облучения выше 4 Гр (рис. 1). Дозовая зависимость интенсивности ТЛ дозиметрического пика при T = 465 К субмикронной керамики  $Al_2O_3$  линейна в интервале доз 0.016–4 Гр, а пика при T = 405 К сверхлинейна в интервале 4–40 Гр.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (договор № 14.125.13.4696–МК – грант Президента РФ).

# Эффективность прессования нанопорошков по схемам Z-и О-пинчей

<u>Болтачев Г.Ш.</u>\*, Волков Н.Б., Чингина Е.А.

### Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: grey@iep.uran.ru

Теоретически изучаются динамические особенности процессов магнитно-импульсного компактирования наноразмерных оксидных порошков по схемам Z- и Θ-пинчей. В качестве объектов исследования выступают две модельные системы, которые соответствуют нанопорошкам на основе оксида алюминия либо не склонным к сильной агломерации (система I), либо в сильно агломерированном состоянии (система II). Квазистатические свойства модельных систем, в частности кривые уплотнения в координатах «давление *p* — плотность ρ», исследованы ранее в рамках метода гранулярной динамики [1].

Показывается, что в схемах радиального прессования инерционные эффекты позволяют достигать давлений в порошке, которые в несколько раз превосходят «магнитное давление» на внешнюю оболочку. Относительно медленная, с длительностью импульса 90 мкс, схема Θ–пинча позволяет реализовать максимально эффективные (резонансные) условия прессования для сплошных цилиндрических порошковых заготовок радиусом около 10 мм. Более скоростная, с длительностью импульса около 15 мкс, схема Z–пинча оказывается оптимальной для компактирования тонких порошковых слоев с толщиной порядка 1–2 мм. В последнем случае уравнение, описывающее динамику механической системы «порошок + проводящая оболочка», в рамках приближений несжимаемости для материала оболочки и однородного уплотнения для порошковой засыпки приведено к виду [2]:

$$\left(\rho_c h_c + \frac{1}{2}\rho_0 h_0\right) \frac{d^2 h}{dt^2} = p(\rho) - p_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{T}\right),\tag{1}$$

где  $\rho_c$  и  $h_c$  — плотность и толщина оболочки,  $\rho_0$  и  $h_0$  — начальные плотность и толщина порошкового слоя,  $p(\rho)$  — противодавление порошка,  $p_0$  — амплитуда магнитного давления. Анализ уравнения (1) позволяет выделить безразмерный комплекс, который определяет динамику процесса:

$$R_Z = \left(\rho_c h_c + \frac{1}{2}\rho_0 h_0\right) \frac{h_0}{T^2 p_0}.$$
 (2)

Установлено, что для внешнего импульса фиксированной и достаточно высокой амплитуды ( $p_0 > 0.4$  ГПа) в обеих модельных системах резонансные условия реализуются в интервале  $0.09 \leq R_Z \leq 0.1$ . При этом удается повысить давление, которому подвергается порошок, до 4–7 ГПа. Столь высокие давления позволяют ожидать, в частности, преодоление критического порога прочности для некоторой доли частиц порошка. Несмотря на бездефектность наночастиц, их прочность имеет предел — напряжение разрушения, которое можно оценить как  $\sigma_u \cong 0.03E$  (E — модуль Юнга). Для оксида алюминия E = 382 ГПа, что дает  $\sigma_u = 11$  ГПа. Таким образом, при приближении давления прессования к 11 ГПа можно ожидать улучшения компактируемости нанопорошков ввиду инициирования необратимых процессов разрушения отдельных наночастиц.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, проект № 12-08-00298-а.

1. Boltachev G.Sh., Lukyashin K.E., Shitov V.A., Volkov N.B., Phys. Rev. E 88, 012209 (2013).

2. Болтачев Г.Ш., Волков Н.Б., Чингина Е.А., Российские нанотехнологии 9, в печати (2014).

# Взаимосвязь микро– и макросвойств оксидных наноразмерных порошков применительно к процессам холодного компактирования

<u>Болтачев Г.Ш.</u><sup>1\*</sup>, Кочурин Е.А.<sup>1</sup>, Максименко А.Л.<sup>2</sup>, Штерн М.Б.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт проблем материаловедения НАНУ, Киев, Украина \*e-mail: grey@iep.uran.ru

Методом гранулярной динамики моделируются процессы одноосного, всестороннего компактирования нанопорошков, а также сдвигового деформирования при постоянном объеме. Высокая степень сферичности и недеформируемость отдельных частиц моделируемых нами оксидных нанопорошков делают метод гранулярной динамики особенно привлекательным и многообещающим инструментом их теоретического анализа. Низкая склонность к пластическому деформированию частиц с размерами 10–100 нм обусловлена их бездефектностью: дислокации из них выталкиваются высокими напряжениями «изображений». Такие частицы, особенно наночастицы оксидной природы, деформируются упруго, восстанавливая свою форму после снятия нагрузки. В рамках гранулярной динамики это обстоятельство позволяет избежать сложностей, связанных с учетом пластичной деформации отдельных частиц.

В работе [1] была развита дискретная трехмерная модель оксидных нанопорошков, с использованием которой удалось воспроизвести их свойства, известные из натурных экспериментов, в частности размерный эффект в процессах компактирования. В настоящем исследовании моделируются две монодисперсные системы, соответствующие оксидным нанопорошкам, проявляющим слабую (система I) и сильную (система II) склонность к агломерации. Численные эксперименты поставлены в 3D геометрии: частицы модельных систем имеют сферическую форму с диаметром 10 нм и обладают как поступательными, так и вращательными степенями свободы. Взаимодействие частиц, помимо широко используемых законов контактного взаимодействия (модифицированный закон Герца, закон Миндлина и т.д.), включает дисперсионные силы притяжения, а также (для системы II) возможность образования/разрушения прочных межчастичных связей. Последние возникают вследствие сильного прижатия частиц друг к другу, которое инициируется либо действием высоких дисперсионных взаимодействий, либо процессом компактирования.

В настоящем исследовании анализируется влияние таких микропараметров порошка, как упругие свойства отдельных частиц (модуль Юнга *E* и коэффициент Пуассона v), энергетический параметр дисперсионного воздействия ( $\varepsilon$ ) на макрохарактеристики порошкового тела. В частности обнаружено, что значения *E* и v слабо влияют на кривые монотонного нагружения, но в значительной степени определяют поведение нанопорошка при сбросе внешнего давления, т.е. на стадиях упругой разгрузки. При сдвиговой деформации модельных ячеек обнаружен эффект положительной дилатансии: в условиях чисто сдвиговых напряжений модельные системы стремятся увеличить свой объем. В выполненных компьютерных экспериментах (при постоянном объеме) это проявляется в положительных значениях гидростатического давления. С уменьшением плотности дилатансия снижается вплоть до смены знака при плотности (плотность Рейнольдса) порядка 31% в системе I и 26% в системе II. Снижение амплитуды дисперсионных сил ( $\varepsilon$ ) в три раза незначительно (на 1–2%) повышает плотность Рейнольдса в обеих системах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 12–08– 00298–а и № 14–08–90404 Укр\_а.

1. Boltachev G.Sh., Lukyashin K.E., Shitov V.A., Volkov N.B., Phys. Rev. E 88, 012209 (2013).

### Термодинамика высококонцентрированных феррожидкостей в отсутствие внешнего магнитного поля

Втулкина Е.Д.\*, Елфимова Е.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: katevtulkina@mail.ru

Работа посвящена теоретическому изучению термодинамических свойств магнитной жидкости в отсутствие внешнего магнитного поля.

Магнитные жидкости представляют собой коллоидные дисперсии магнитных материалов (ферромагнетиков: магнетита, ферритов) с частицами размером от 5 до 10 нанометров, формой, близкой к сферической, стабилизированные в полярной (водной или спиртовой) и неполярной (углеводороды и силиконы) средах с помощью поверхностно–активных веществ или полимеров. Простейшей моделью представления частиц магнитной жидкости является модель дипольных твердых сфер, интенсивно взаимодействующих посредством магнитных диполь–дипольных сил [3]. В качестве меры такой интенсивности традиционно используется параметр магнитно–дипольного взаимодействия  $\lambda$ .

Рассматривается свободная энергия Гельмгольца. Строится обратное кумулянтное преобразование вириального разложения свободной энергии Гельмгольца [1], где свободная энергия системы дипольных твердых сфер описывается логарифмической функцией, аргумент которой выражается через второй, третий, четвертый и пятый вириальные коэффициенты. Четвертый и пятый вириальные коэффициенты были определены методами компьютерного моделирования как функции интенсивности диполь–дипольного взаимодействия. Для вычисления коэффициентов использовался метод Mayer–sampling моделирования [2]. На основе данных компьютерного моделирования методом наименьших квадратов были получены аналитические выражения для четвертого и пятого вириальных коэффициентов.

Проведено сравнение результатов теории и компьютерного моделирования [1] для свободной энергии и химического потенциала. Полученные аналитические выражения согласуются с данными компьютерного моделирования в области параметров  $\lambda = 1$  и  $\lambda = 2$  даже при очень высоких значениях объемной концентрации дипольных твердых сфер ( $\varphi = 0.4$ ). Для  $\lambda = 3$  теория согласуется с результатами компьютерного моделирования при концентрации  $\varphi = 0.33$ . Для более интенсивного межчастичного диполь-дипольного взаимодействия новая теория способна корректно предсказать поведение исследуемых систем при концентрациях  $\varphi = 0.1$ .

С практической точки зрения полученная аппроксимация очень проста в использовании и может служить основой для предсказания свойств магнитных жидкостей.

- 1. Elfimova E.A., Ivanov A.O., Camp P.J., Phys. Rev. E 86, 021126 (2012).
- 2. Singh J.K. and Kofke D.A., Phys. Rev. Lett. 92, 220601 (2004).
- 3. Балеску Р., Равновесная и неравновесная статистическая механика, Мир (1978).

### Зависимость геометрических характеристик нанотубулярного слоя TiO<sub>2</sub> от времени анодирования во фторсодержащем растворе этиленгликоля

Дорошева И.Б.<sup>1</sup>\*, Камалов Р.В.<sup>1</sup>, Вохминцев А.С.<sup>1</sup>, Валеева А.А.<sup>1,2</sup>, Вайнштейн И.А.<sup>1</sup>, Ремпель А.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: dorosheva1993@mail.ru

В последнее время нанотубулярные слои диоксида титана привлекают большое внимание исследователей в связи с разработкой на их основе эффективных фотоэлектрических преобразователей, фотокатализаторов, мемристорных элементов памяти и др. [1]. Наиболее распространенным методом получения нанотубулярных слоев TiO<sub>2</sub> является анодное окисление титановой подложки в электролите, содержащем фторид–ионы. Известно, что морфология синтезированных наноструктурированных слоев зависит от условий синтеза: концентрации и температуры электролита, значений напряжения и тока в электрохимической ячейке, а также времени анодирования и др. В связи с этим цель работы состояла в определении зависимости параметров упорядоченного нанотубулярного слоя диоксида титана от времени анодирования.

Анодирование титановой фольги марки ВТ1–0 толщиной 100 мкм проводилось в электрохимической ячейке с термостатированием при температуре 20°С [2]. Формирование оксидного слоя происходило в потенциостатическом режиме U = 20 В с длительностью  $t_A = 15$ , 30, 60, 120, 180 и 360 мин. В качестве электролита использовался фторсодержащий (NH<sub>4</sub>F, 1 мас. %) раствор этиленгликоля. Геометрическая площадь анодированных слоев составляла  $\approx 4$  см<sup>2</sup>. Исследования морфологии синтезированных образцов проведены на растровом электронном микроскопе (РЭМ) Carl Zeiss SIGMA VP. Дальнейшая обработка полученных РЭМ–изображений выполнялась в программе Клинкер С7 компании SIAMS.

В результате анализа РЭМ-снимков и проведенных вычислений получены значения внутреннего  $D_{\text{in}} = 27 \div 39$  нм и внешнего  $D_{\text{out}} = 42 \div 53$  нм диаметров нанотрубок, их длины L, а также выполнены оценки величины твердой доли A и эффективной площади поверхности S синтезированных нанотубулярных слоев TiO<sub>2</sub>. Показано, что при увеличении  $t_A$  параметр A уменьшается от 0.39 до 0.25. В то же время значения L = 1.5 мкм и S = 415 см<sup>2</sup> для выращенного массива являются максимальными при  $t_A = 120$  мин.

Проведено обсуждение возможных механизмов формирования упорядоченного нанотубулярного слоя TiO<sub>2</sub> с учетом особенностей окисления металлического титана и растворения образованного слоя в зависимости от времени. Продемонстрировано, что оба процесса зависят от электрохимических свойств системы и кинетических параметров протекающих реакций, о чем свидетельствует наличие максимума. Таким образом, обосновано наличие и экспериментально определено оптимальное время анодирования ( $t_A = 120$  мин) при описанных в работе условиях для улучшения геометрических характеристик синтезированных нанотубулярных слоев TiO<sub>2</sub> с точки зрения фотовольтаики и фотокатализа.

- 1. Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А., Камалов Р.В., Дорошева И.Б., Известия РАН. Серия физическая **78**, 9, 1176 (2014).
- 2. Дорошева И.Б., Вохминцев А.С., Камалов Р.В., Вайнштейн И.А., Тезисы докладов СПФКС–14, ИФМ УрО РАН (2013).

# Сенсор ацетона на основе тонких плёнок SnO<sub>2</sub>, модифицированных благородными металлами

#### Дробот А.В., Рудов Ф.В.\*

#### Томский государственный университет, Томск, Россия \*e-mail: f.rudov@ngs.ru

Анализ воздуха, выдыхаемого человеком, дает возможность определять состояние человека. Состав выдыхаемой смеси достаточно сложен, кроме основных газов (N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O) в ней содержатся летучие органические вещества — продукты метаболизма организма. Известно, что при различных заболеваниях, вызванных нарушением обменных процессов в организме, состав выдыхаемой смеси значительно меняется, в частности, при заболевании сахарным диабетом в ней существенно повышается содержание ацетона (1–10 ppm — норма для здорового человека, от 80 ppm — больного). Этот факт может быть использован для неинвазивной (отсутствие необходимости забора крови у пациента) диагностики состояния больных сахарным диабетом (СД) [1]. К сожалению, использование метода контроля состояния больных СД по выдыхаемой смеси затруднено отсутствием надежных и при этом сравнительно недорогих методов выявления низких концентраций ацетона в воздухе. Сенсоры на основе тонких плёнок диоксида олова SnO<sub>2</sub>, изучению которых посвящена данная работа, являются перспективным решением поставленной задачи, т.к. сочетают высокую чувствительность к парам ацетона и невысокую стоимость.

В настоящей работе были изучены особенности адсорбционного отклика на ацетон сенсоров на основе тонких плёнок SnO<sub>2</sub>, полученных методом магнетронного напыления, модифицированных различными благородными металлами: №1 — Pt/Pd/SnO<sub>2</sub> : Sb; №2 — Au/SnO<sub>2</sub> : Sb, Au; № 3 и 4 — Au/SnO<sub>2</sub> : Sb, Au, Ni [2].

При введении в камеру ацетона наблюдается снижение сопротивления плёнок и, соответственно, рост проводимости до значения  $G_g^{\rm cr}$ . При прокачке камеры чистым воздухом значение проводимости восстанавливается до прежнего значения. Показано, что для детектирования ацетона оптимальной является рабочая температура 670 К, которая обеспечивает достаточные значения отклика и быстродействие сенсоров.

Концентрационные зависимости отклика всех изученных образцов при воздействии паров ацетона и этанола являются сублинейными, что характерно для модели полупроводниковых сенсоров, учитывающей наличие мостиков проводимости [2].

В случае плёнок с нанесенными дисперсными слоями Pt/Pd наблюдаются высокие значения отклика на пары ацетона. Однако отклики снижаются по мере увеличения относительной влажности от 7 до 80%. Плёнки из серии № 2, модифицированные золотом в объеме и на поверхности, характеризуются пониженными значениями отклика на ацетон, но высокой стабильностью параметров сенсоров при различных уровнях влажности и в процессе долговременных испытаний [2].

Наибольший интерес для создания ацетономера представляют плёнки с добавлением примеси Ni в объёме, отличающиеся высокими значениями отклика на ацетон, а также их независимостью от уровня влажности в диапазоне 20–80%, который представляет практический интерес.

В технологию создания сенсоров ацетона необходимо включать операцию старения, поскольку при испытаниях в течение первых 6–8 суток наблюдается изменение сопротивления и снижение отклика на ацетон сенсоров из серий № 1, 3 и 4, в последующие 10–20 суток параметры стабилизируются.

1. Righettoni M., Tricoli A., Pratsinis S.E., Anal. Chem. 82, 3581 (2010).

2. Рудов Ф.В., Севастьянов Е.Ю., Максимова Н.К. и др., ФПСМ 11(2), 245 (2014).

# Вычисление свободной энергии и давления в магнитной жидкости с учётом Ван–дер–Ваальсова взаимодействия. Данные теоретических вычислений и компьютерного моделирования

Елфимова Е.А.\*, Турышева Е.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: tais\_kat@list.ru

Настоящая работа посвящена вычислению свободной энергии и давления магнитных жидкостей, которые представляют собой устойчивые взвеси наноразмерных частиц ферромагнитных материалов в жидкостях носителях. Характерный диаметр магнитных ядер частиц имеет порядок 10 нм, а их форма близка к сферической. С фундаментальной точки зрения физики жидкостей, принципиальной особенностью магнитных жидкостей является определяющая роль межчастичных взаимодействий магнитной природы, описываемых потенциалом диполь–дипольного взаимодействия. Кроме того, в нашей работе мы уделяем большое внимание взаимодействию немагнитной природы, описываемому потенциалом «прямоугольная потенциальная яма», который является простейшим потенциалом, описывающим Ван–дер–Ваальсово взаимодействие.

Для вычисления свободной энергии используются результаты классического вириального разложения и диаграммное разложение, предложенное в [1]. Для этого мы находим аналитические формулы второго и третьего вириальных коэффициентов для модели, где взаимодействие частиц магнитной жидкости описывается суммой потенциалов: диполь–дипольного и «прямоугольная потенциальная яма». Полученные аналитические выражение были сопоставлены с результатами компьютерного моделирования, проведенного методом выборки Майера (Mayer sampling), представленного в [2]. В результате были найдены ограничения на параметр, характеризующий интенсивность диполь–дипольного взаимодействия, связанные с применимостью диаграммного разложения.

Для всех рассмотренных величин параметров, характеризующих интенсивность недипольного взаимодействия, наблюдается хорошее согласование результатов компьютерного моделирования и теоретических данных.

Зная аналитические выражения для второго и третьего вириальных коэффициентов, мы можем получить формулы для конфигурационной части свободной энергии и давления. С учётом ограничений на параметр, отвечающий за интенсивность диполь–дипольного взаимодействия были построены графики данных характеристик. Результат мы сравнили с данными компьютерного Монте–Карло моделирования [3] и получили хорошее согласование.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и образования РФ, соглашение № 02.А03.21.0006 от 27.03.2013.

- 1. Балеску Р., Равновесная и неравновесная статистическая механика, М.: Мир (1978).
- 2. Singh J.K., Kofke D.A., Phys. Rev. Lett. 92, 220601 (2004).
- 3. Turysheva E.V., Solovjova A.Yu., Elfimova E.A., Thermodynamics of dipolar square–well fluids, Fluid Phase Equilibria (направлена в печать).

# Влияние влажности на электрические и газочувствительные характеристики сенсоров паров ацетона

Золотарёва Г.Р., Рудов Ф.В.\*

Томский государственный университет, Томск, Россия \*e-mail: f.rudov@ngs.ru

В настоящее время полупроводниковые газовые сенсоры находят широкое применение как в промышленности, так и в быту. Развитие медицинской техники для контроля состояния человека по анализу выдыхаемого воздуха дает возможность определять на ранних стадиях ряд заболеваний, таких как язва, туберкулёз, «чума XXI века» — сахарный диабет. При различных заболеваниях, вызванных нарушением обменных процессов в организме, состав выдыхаемой смеси значительно меняется, в частности, при заболевании сахарным диабетом в ней существенно повышается содержание ацетона, при туберкулёзе повышается содержание диоксида азота. Основной метод контроля состояния больных — это забор крови у пациента и анализ концентрации в ней глюкозы. Поэтому остро стоит задача найти замену этому способу. В связи с этим целесообразно использовать металлооксидные полупроводники (SnO<sub>2</sub>, WO<sub>3</sub> и др.) в качестве чувствительных элементов, обладающих высокими откликами на воздействие паров ацетона.

Один из важных недостатков газовых сенсоров — это высокая чувствительность к влажности. При изменении абсолютной влажности происходит изменение электрических и газочувствительных свойств, что приводит к росту погрешности, которая недопустима при детектировании низких концентраций ацетона. В результате этого в данной работе изучено влияние влажности на электрические и газочувствительные характеристики сенсоров паров ацетона на основе тонких плёнок SnO<sub>2</sub>, полученных методом магнетронного напыления [1]:  $N_0$  1 — Pt/Pd/SnO<sub>2</sub> : Sb;  $N_0$  2 — Au/SnO<sub>2</sub> : Sb, Au.

Исследование влияния влажности на электрические и газочувствительные характеристики сенсоров из серий № 1 и № 2 проводили при трех уровнях влажности, рабочей температуре T = 723 К и концентрации паров ацетона  $n_g = 10$  ppm.

С ростом абсолютной влажности наблюдается увеличение проводимости  $G_0$  сенсоров в чистом воздухе для всех изученных образцов. Однако важно отметить, что величина отклика  $G_1/G_0$  для образцов из серии № 2 не зависит от уровня влажности, в отличие от образцов из серии № 1. Это обусловлено низкой плотностью хемосорбированного кислорода на поверхности плёнок, модифицированных золотом. В результате этого не происходит изменения теплоты адсорбции, которая определяет величину отклика и стабильность работы сенсора в среде с изменяющейся влажностью.

Тип сенсора	№1 (Pt/Pd/SnO <sub>2</sub> :Sb)			№2 (Au/SnO <sub>2</sub> : Sb, Au)		
RH, %	5	30	85	5	30	85
t <sub>r</sub> , c	54	30	24	23	18	16
<i>G</i> <sub>0</sub> , мкСм	0.31	0.42	0.53	1.86	2.15	2.42
$G_1/G_0$	3.2	1.9	1.4	1.9	1.7	1.6

Отметим, что с увеличением уровня влажности увеличивается быстродействие сенсоров. Повидимому, вода заполняет поры между микрокристаллами, в результате затруднена диффузия крупных молекул ацетона между микрокристаллами и уменьшаются времена отклика *t*<sub>r</sub> [1]. Для более детального анализа необходимы дополнительные исследования.

1. Рудов Ф.В., Севастьянов Е.Ю., Максимова Н.К. и др. ФПСМ 11, 2, 245 (2014).

### Зернограничная диффузия в наноструктурных материалах для случая мгновенного источника диффузанта

Кесарев А.Г.\*, Кондратьев В.В., Ломаев И.Л.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: kesarev@bk.ru

Особенности структуры и физических свойств получаемых путем интенсивной пластической деформации нано-и субмикроскопических (СМК) материалов могут быть связаны с неравновесностью границ зерен, при которой формируются приграничные области ускоренного массопереноса [1]. При пониженных температурах, когда массоперенос внутри зерен невозможен, диффузионные процессы в этих материалах и их термическая стабильность определяются главным образом зернограничной диффузией (ЗГД) атомов. Корректная интерпретация экспериментов по ЗГД при учете приграничных зон с целью получения структурных и диффузионных данных требует развития адекватных теоретических подходов в этой проблеме, что является предметом исследования данной работы. Используя асимптотические методы решения дифференциальных уравнений, нами получены выражения для профилей концентрации в объеме и на границе зерна, а также экспериментально измеряемой плотности слоевой концентрации (активности) на переходных стадиях между С- и В-режимом отжигов. В продолжение работы [2], в которой нами была представлена теория ЗГД для стационарного источника диффузанта на свободной границе образца, здесь мы рассмотрели другой практически важный случай, когда задан тонкопленочный («мгновенный») источник. Используя качественные оценки, а также численные расчеты, выполненные в рамках более общей задачи для такого источника [3], нами предложено выражение для плотности слоевой концентрации, применимое в широком диапазоне диффузионных отжигов. Проанализированы особенности ЗГД, связанные с учетом приграничных зон ускоренного массопереноса и спецификой «мгновенного» диффузионного источника. Дана оценка ошибки при определении коэффициента ЗГД, если пренебрегать оттоком диффузанта в приграничную зону. Показано, что вблизи источника этот отток приводит к повышению, а вдали от него — к понижению средней слоевой концентрации. Для ряда СМК материалов, для которых имеются диффузионные эксперименты [4–6], даны оценки глубины насыщения приграничных диффузионных зон. Как оказалось, зоны ускоренного массопереноса должны проявляться при достаточно высоких температурах и длительных временах отжига, что (по нашим оценкам) выполняется в материалах, содержащих примеси, которые увеличивают термическую стабильность нано- и СМК структур. Из того факта, что в выражение для профиля зернограничной концентрации, а также плотности слоевой концентрации входит только максимальное значение коэффициента диффузии в приграничной зоне, следует интересный вывод о пригодности нашего подхода и к классическим поликристаллам с равновесными границами зерен в довольно широком интервале отжигов между С- и В-режимом.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Деформация» № 01201463327 (проект № 12–У–2–1004).

1. Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Материаловедение 4, 60 (2010).

2. Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Ломаев И.Л., ФММ **109**, 4, 357 (2010).

3. Suzuoka T., J. Phys. Soc. Japan 19, 839 (1964).

4. Грабовецкая Г.П., Раточка И.В., Колобов Ю.Р. и др., ФММ **83**, 1, 112 (1997).

5. Divinsky S.V., Reglitz G., Rosner H., Estrin Y., Wilde G., Acta Mater. 59, 1974 (2011).

6. Ribbe J., Baither D., Schmitz G., Divinski S.V., Scr. Mater. 61, 129 (2009).

### Импульсная катодолюминесценция наноструктурной керамики оксида алюминия при различных режимах синтеза

Киряков А.Н.\*, Ананченко Д.В., Звонарев С.В., Кортов В.С.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: Seni-i@yandex.ru

Люминесцентные и дозиметрические свойства наноструктурного оксида алюминия широко исследуются в настоящее время в связи с перспективой создания на их основе высокодозных детекторов ионизирующего излучения.

Нами изучалась импульсная катодолюминесценция (ИКЛ) синтезированной при различных температурах керамики оксида алюминия. Порошок  $Al_2O_3$  высокой чистоты с размером частиц 50–70 нм, полученный алкоголятным методом, прессовался в компакты при давлении 1 т/см<sup>2</sup>, которые затем были отожжены в вакуумной электропечи СНВЭ–9/18 в присутствии графита в температурном диапазоне от 1500°C до 1700°C и при остаточном давлении >  $10^{-2}$  Па. Время отжига образцов составляло: 15, 30 и 60 мин. У полученных образцов была измерена масса, площадь и спектр ИКЛ при параметрах возбуждающего пучка электронов: длительность импульса 2 нс, энергия электронов 130 кэВ, плотность тока 60 А/см<sup>2</sup>. Отжиг в вакууме в присутствии углерода (сильно восстановительная среда) необходим для создания в керамике кислородных вакансий, образующих F–центры, которые служат электронными ловушками и активно участвуют в процессе люминесценции.

Отжиг в вакууме приводит к изменению массы и площади поверхности образца относительно исходного состояния, что подтверждают результаты в табл. 1.

	5	1	1/1 1	1 1
Параметр	Исходный	Отож. 1700°С,	Отож. 1700°С,	Отож. 1700°С,
	образец	15 мин	30 мин	60 мин
Площадь, мм <sup>2</sup>	19.6	10.86	7.74	4.16
Масса, мг	40	30.3	29.6	6.2

Таблица 1. Результаты измерений массы и площади поверхности образцов.

Можно предположить, что при высокотемпературном отжиге оксида алюминия в присутствии графита происходит не только нарушение стехиометрии в кислородной подрешетке, но и разложение оксида на низшие оксидные соединения и их сублимация.



Рис. 1. КЛ наноструктурной керамики  $Al_2O_3$ , отожженной при температуре 1700°С, и временем выдержки: 15, 30 и 60 мин.

Спектр ИКЛ керамики, синтезированной при 1700°С, содержит уширенную полосу F-центров с максимумом при 420 нм. Интенсивность этой полосы не зависит от времени отжига. Интересным является тот факт, что у образцов, отожженных 15 мин и 30 мин, наблюдаются новые полосы с максимумом при 540 и 700 нм. Первая полоса может быть связана с агрегационными центрами F2-типа в различном зарядовом состоянии. Отсутствие такого пика у образца, отожженного в течение 60 мин, может быть вызвано концентрационным тушением F2-центров.

Следует также отметить, что у образцов 1 и 3 наблюдается широкая полоса свечения в области 650–750 нм. Её природа пока не установлена. Имеется предположение, что эта полоса вызвана возбуждением примесных ионов  $\mathrm{Cr}^{3+}$  и Ti<sup>3+</sup>.

# Получение нанотрубок анодированного ZrO<sub>2</sub> в электролитах на основе водных растворов этиленгликоля

<u>Кожевина А.В. <sup>1,2</sup>\*</u>, Камалов Р.В. <sup>1,2</sup>, Вохминцев А.С. <sup>1,2</sup>, Вайнштейн И.А. <sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Научно-образовательный центр «Наноматериалы и нанотехнологии», Екатеринбург, Россия \*e-mail: fisics@yandex.ru

Синтезированные методом анодного окисления во фторсодержащем электролите нанотубулярные (HT) слои ZrO<sub>2</sub>–HT проявляют фотолюминесцентные [1] и мемристивные [2] свойства, что позволяет говорить о перспективах создания материалов с уникальной комбинацией оптических и электрофизических характеристик. Геометрические параметры и степень дефектности синтезированного наноструктурного диоксида циркония зависят от условий синтеза: времени анодирования, значений напряжения и тока в электрохимической ячейке, температуры, состава электролита и концентрации содержащихся в нем компонентов. Целью настоящей работы являлось изучение влияния содержания воды в электролите на основе этиленгликоля на морфологию синтезированных наноструктурированных слоев диоксида циркония.

Процесс анодирования проводился в электрохимической ячейке с термостатированием. В качестве анода выступала пластина из циркониевого сплава Э110 (Nb 1 мас. %) толщиной 0.3 мм, а катода — стальная пластина. Электролитом служил раствор этиленгликоля с добавкой 0.5 мас.% соли NH<sub>4</sub>F и разным содержанием воды: C = 0.0, 1.0, 2.5, 5.0, 7.5 и 10.0 мас.%. Процесс электрохимического окисления проводился в потенциостатическом режиме в течение 1 часа при напряжении 120 В и температуре 20°С. Перед началом эксперимента циркониевая пластина подвергалась первичному анодированию, травилась в смеси кислот HF и HNO<sub>3</sub>, затем помещалась в ультразвуковую ванну на 10 мин, промывалась дистиллированной водой и сушилась ацетоном. Исследования поверхности и сколов полученных образцов проводились на растровом электронном микроскопе SIGMA VP Carl Zeiss с InLens детектором.

Показано, что слой диоксида циркония, полученный в электролите без добавления воды, является пористым. Однако при  $C \ge 1.0$  мас.% синтезируются уже вертикально ориентированные массивы нанотрубок с внешним  $D_{\rm out} = 90-120$  нм и внутренним  $D_{\rm in} = 60-75$  нм. В то же время диаметр нанотрубок при варьировании C изменяется незначительно. Продемонстрировано, что с ростом C от 1 до 10% увеличивается толщина нанотубулярного слоя от 6 до 11 мкм.

Таким образом, установлено влияние воды на геометрические параметры сформированных наноструктурированных слоев диоксида циркония. Проведено обсуждение возможных механизмов формирования упорядоченного нанотубулярного слоя ZrO<sub>2</sub> с учетом особенностей окисления металлического циркония и растворения образованного слоя в зависимости от содержания воды в электролите. Продемонстрировано, что оба процесса зависят от электрохимических свойств системы и кинетических параметров протекающих реакций.

- 1. Кожевина А.В., Вохминцев А.С., Камалов Р.В., Вайнштейн И.А., Тезисы I Международной молодежной научной конференции, посвященной 65–летию основания Физико-технологического института, Екатеринбург: УрФУ (2014).
- 2. Wu X., Zhou P., Li J. et al., Appl. Phys. Lett. 90, 183507 (2007).

# Начальная стадия механического сплавления в бинарной системе на основе Cr с Fe

Колодкин Д.А.\*, Елсуков Е.П., Ульянов А.Л., Порсев В.Е. Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия \*e-mail: denchkol88@gmail.com

Методами Оже–спектрометрии, рентгеновской дифракции и мёссбауэровской спектроскопии изучена начальная стадия механического сплавления в бинарных системах Сг–Fе в атомных соотношениях 80 : 20 и 99 : 1 (<sup>57</sup>Fe). Использование зондовой мёссбауэровской спектроскопии при MC смеси Cr(99)/<sup>57</sup>Fe(1) позволило надежно обнаружить



Рис. 1. Зависимости удельной поверхности границ зерен  $S_{\rm L}$  — (*a*) и выхода реакции N — (*б*) от дозы механической энергии  $D_{\rm MC}$ ; 1 — система  $Cr(99)/^{57}$ Fe(1), 2 — Cr(80)/Fe(20).

(9)/<sup>67</sup> Fe(1) позволило надежно оонаружить формирование кластеров оксидов  $Cr(Fe)_x O_y$  в месте контакта частиц Cr и <sup>57</sup> Fe на самых ранних стадиях механической обработки. С увеличением содержания естественного Fe в исходных смесях этот эффект не будет обнаруживаться из–за ограничения по чувствительности мёссбауэровской спектроскопии.

С увеличением времени механического сплавления и формированием наноструктурного состояния происходит деструкция кластеров оксидов и растворение О в матрице Сг. Появление О в позициях внедрения ОЦК Сг приводит к увеличению параметра решетки Сг. С формированием наноструктуры в Сг атомы Fe проникают через границы зерен в приграничные искаженные зоны интерфейсов и затем в объем зерен. Процесс характеризуется неоднородным концентрационным распределением атомов Fe в Cr.

Установлена линейная зависимость продуктов реакции и удельной поверхности границ зерен на начальной стадии МС от дозы механической энергии (рис. 1). Можно предположить, что линейная зависимость выхода продуктов реакции обусловлена резким ростом размера частиц

на начальной стадии MC и, как следствие, меньшей реальной дозой механической энергии, затрачиваемой на выход реакции в среднем по объему частицы.

# Исследование аналитических характеристик вольтамперометрических сенсоров на основе многостенных углеродных нанотрубок

### <u>Косых А.С.</u>\*, Малахова Н.А., Сараева С.Ю., Колядина Л.И., Вохминцев А.С., Ищенко А.В., Вайнштейн И.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: aleno-4ka@list.ru

В настоящее время углеродные нанотрубки (УНТ) благодаря большой удельной поверхности, хорошей проводимости и высокой адсорбционной способности широко используются в качестве модификаторов при изготовлении электрохимических сенсоров для анализа проб воды, почвы, продуктов питания и различных биологических материалов на содержание следовых количеств тяжелых металлов (Al, Fe, Co, Ni, Ti и др.). В то же время, по нашим данным, отсутствуют сведения о применении УНТ в качестве модификаторов толстопленочных углеродсодержащих электродов (ТУЭ) для определения ионов тяжелых металлов в растворе методом адсорбционной инверсионной вольтамперометрии (АдИВ). Таким образом, цель настоящей работы заключалась в определении характеристик ТУЭ, модифицированных многостенными УНТ, на примере обнаружения ионов железа в модельном растворе методом АдИВ.

Изготовлены вольтамперометрические сенсоры, модифицированные многостенными УНТ [1] от разных производителей: УНТ–1 (НОЦ НАНОТЕХ, УрФУ) со средним диаметром  $d \approx 23$  нм и УНТ–2 (Sigma–Aldrich, USA) с  $d \approx 147$  нм соответственно. Исследование электродов проводили на вольтам-перометрическом анализаторе «ИВА–5» методом АдИВ [2]. Фоновым электролитом служил раствор, содержащий 0.1 моль/л ацетата натрия и  $5 \cdot 10^{-2}$  моль/л пирокатехола. Электролиз проводили при потенциале 0.1 В и времени накопления 5 с.

По результатам оценки линейности градуировочных графиков (в интервале 0.5–5.0 мкг/л) рассчитаны пределы обнаружения (ПрО) для каждого типа электродов. ПрО ионов Fe (III) с использованием ТУЭ, модифицированных УНТ, составляет 0.20 и 0.16 мкг/л для УНТ–1 и УНТ–2 соответственно по сравнению с 0.5 мкг/л для немодифицированных электродов. Можно предположить, что понижение ПрО ионов Fe (III) при модифицировании электродов УНТ обусловлено увеличением емкости и/или уменьшением электрического сопротивления электрода.

Оценка правильности результатов анализа методом «введено–найдено» показала, что показатель правильности для модифицированных ТУЭ близок к 97%, в отличие от 66.5% для немодифицированных электродов. Измерения, проведенные на ТУЭ, модифицированных УНТ–1 и УНТ–2, более воспроизводимы: относительное стандартное отклонение (RSD) составляет 7.5 и 6.3% соответственно по сравнению с немодифицированными электродами, где RSD — 15.9%. Установлено, что при хранении в течение 1.5 месяцев ТУЭ, модифицированных УНТ–1 и УНТ–2, чувствительность сенсоров уменьшается на 25 и 50% соответственно без снижения показателя правильности и воспроизводимости. Для количественного определения следовых содержаний элементов в растворе предпочтительнее использовать ТУЭ, модифицированные УНТ–1, поскольку аналитические характеристики данного сенсора более стабильны при хранении в нормальных условиях.

1. Косых А.С. и др., Тезися докладов СПФКС-14, ИФМ УрО РАН (2013).

2. Stozhko N.Yu., Inzhevatova O.V., Kolyadina L.I., J. Anal. Chem. 60, 747 (2005).

### Влияние наноструктуры на фотолюминесценцию оксида алюминия

Лукманова А.М.\*, Кортов В.С., Звонарев С.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: almira.lukmanova@gmail.com

Нанокерамика на основе оксида алюминия обладает рядом физико–химических особенностей. Фундаментальные исследования показали, что наноструктурный Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> обладает уникальными оптическими свойствами, высокоразвитой поверхностью, каталитической активностью [1]. Наноструктурный оксид алюминия может использоваться в микроэлектронике, оптике, атомной энергетике, медицине, биотехнологиях и других областях.

Нанопорошок  $Al_2O_3$  прессовался на гидравлическом прессе SPECAC в форме таблеток диаметром 5 мм, который был получен алкоголятным методом в ЗАО «ВНИИОС НК». Отжиг производился в камерной электропечи СНВЭ–9/18 при T = 1700°C в течение 1 часа при наличии графита. Для получения спектров возбуждения и эмиссии использовался люминесцентный спектрометр LS 55 в режиме фосфоресценции.

В результате исследования были получены спектры возбуждения и эмиссии, представленные на рис. 1. С помощью программы PeakFit графики были разложены на элементарные гауссовы кривые. На спектре возбуждения стоит отметить пики, равные 205 (F<sup>+</sup>), 210 (Ti<sup>4+</sup>) и 220 (F) нм, а на спектре излучения виден пик, соответствующий 415 (F) нм. Найденные полосы соответствуют собственным и примесным центрам возбуждения оксида алюминия. Интенсивность возбуждения и эмиссии наноструктурного образца значительно ниже, чем у монокристалла. Следовательно, можно сделать вывод о том, что данный режим позволяет уменьшить количество дефектов F типа [2].



Рис. 1. Спектр фотолюминесценции. (a) — возбуждения при эмиссии 415 нм; (b) — эмиссии при возбуждении 208 нм.

Результаты показали, что полосы возбуждения и свечения у наноструктурного и монокристаллического Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> совпадают. При этом интенсивность фотолюминесценции в указанных полосах у наноструктуры значительно ниже, чем у монокристалла. С целью увеличения интенсивности фотолюминесценции необходимо формирование наноструктурных керамик с большей концентрацией активных центров. Это может быть сделано путем подбора режимов синтеза, в частности увеличении длительности отжига.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (договор № 14.125.13.4696–МК — грант Президента РФ) и УрФУ (грант молодым ученым–кандидатам наук).

1. Kukreja L.M., Misra P., Fallert J., Phase D.M., Kalt H., Journal of Applied Physics 112, 1-10 (2012).

2. Ковба Л.М., Соросовский образовательный журнал 6, 43 (1996).

# Синтез интерметаллических тонких пленок при отжиге бинарных металлических тонкопленочных систем

Макрушина А.Н.\*, Плотников В.А., Макаров С.В.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия \*e-mail: makrushina3008@mail.ru

Для изучения синтеза интерметаллических соединений в бинарных металлических тонких пленках были получены пленки методом резистивного испарения и последующей конденсации паров металла на подложку из силикатного стекла в вакууме при остаточном давлении 10<sup>-5</sup> мм. рт. ст.

Процессы синтеза были изучены на примере тонких бинарных пленок Cu/Sn. Активация синтеза осуществлялась в ходе нагрева с умеренной скоростью пленки и подложки до 600°C. В ходе такого отжига синтез интерметаллических соединений системы Cu–Sn осуществлялся двояким путем: либо в виде волны синтеза, которая с большой скоростью пробегала по поверхности бинарной пленки, либо в виде объемного синтеза без формирования волны синтеза.

Идентификация продуктов синтеза была осуществлена рентгенофазовым анализом тонких пленок с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН–3.0.

Анализ рентгеновских данных показал, что на рентгенограммах исходной бинарной пленки Cu/Sn наблюдаются четко выраженные рефлексы, обусловленные интерметаллической фазой и чистым оловом. На рентгенограммах отожженных участков бинарных пленок наблюдаются рефлексы, свидетельствующие о том, что в ходе синтеза возникла только интерметаллическая фаза. Анализ межплоскостных расстояний позволяет идентифицировать интерметаллическую фазу как соединение  $Cu_6Sn_5$  [1].

В процессе синтеза протекают твердофазные превращения с образованием фазы с объемноцентрированной кубической (ОЦК) решеткой соединения Cu<sub>6</sub>Sn<sub>5</sub>. На основании исследования продуктов синтеза в пленках Cu/Sn не обнаружены известные фазы с гексагональной или орторомбической решеткой. Обнаруженная новая фаза имеет ОЦК-решетку и представляет собой упорядоченную структуру (сверхструктуру).

Как в случае волны синтеза, так и объемного зарождения наблюдается формирование реакционных островков. В случае объемного зарождения очаги равномерно распределяются по поверхности пленки. В случае волны синтеза генерирование реакционных зон (островков) локализовано в границе раздела, где концентрация этих островков максимальна. В этой связи тепловой эффект реакции так же локализован во фронте волны и обеспечивает процесс множественного зарождения островков.

1. Гирин О.Б., Захаров И.Д., Восточно-Европейский журнал передовых технологий 4/5, 46, 63 (2010).

# Зарядовые состояния катионов в наноструктурированных кобальтитах GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.5</sub>, исследованные методом рентгеновской абсорбционной спектроскопии

<u>Месилов В.В.</u>\*, Галахов В.Р., Шамин С.Н., Гижевский Б.А., Наумов С.В., Телегин С.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: mesilov@imp.uran.ru

Исследование зарядового состояния катионов в наноструктурированных оксидах кобальта представляется важным для понимания природы наносостояния этих соединений. В данной работе с помощью метода рентгеновской абсорбционной спектроскопии и расчетов атомных мультиплетов определены зарядовые состояния катионов в наноструктурированных кобальтитах GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.5</sub>, полученных методами интенсивной пластической деформации.

Наноструктурированные высокоплотные керамики GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.5</sub> получены из исходных крупнозернистых образцов методом интенсивной пластической деформации путем одноосного сжатия, а также посредством деформации сдвига под давлением до 7 ГПа. Для этих целей использовали пресс усилием 100 тонн и наковальни Бриджмена. Размеры кристаллитов, оцененные по уширению рентгеновских дифракционных линий, составили порядка 40 нм. Для получения наноструктурированного состояния порошка исходный крупнозернистый порошок GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.5</sub> подвергали размолу в вибромельнице в течение 6 часов. Измельчение осуществляли на воздухе без применения дополнительных сред. Новые фазы в наноструктурированных оксидах кобальта, полученных вышеупомянутыми методами, не зафиксированы. Рентгеновские абсорбционные спектры наноструктурированных кобальтитов измерены в поверхностно–чувствительном режиме полного электронного выхода на Российско–Германской линии накопительного кольца BESSY–II (Берлин). Атомные мультиплеты рентгеновских абсорбционных спектров рассчитаны с учетом кислородного окружения вокруг ионов кобальта, расщепления кристаллическим полем и зарядового переноса от кислорода к металлу.

Из анализа экспериментальных и теоретических данных установлено, что в нанокерамиках GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5,5</sub>, полученных кручением под давлением, часть ионов кобальта понижает состояние окисления от  $Co^{3+}$  до  $Co^{2+}$  благодаря формированию дефектов по кислороду. При этом происходит изменение величины параметра расщепления кристаллическим полем и кислородного окружения части трехвалентных ионов кобальта. Размол GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5 5</sub> в вибромельнице в течение 6 часов не приводит к изменению рентгеновских Со 2p-спектров в наноструктурированном кобальтите по сравнению с крупнозернистым, поэтому степень окисления ионов кобальта 3+ сохраняется. Однако наблюдается значительное различие рентгеновских O 1s-спектров поглощения образцов до и после размола, что указывает на изменение химической связи атомов кислорода и может быть связано с перераспределением кислорода по различным кристаллографическим позициям в слоистой структуре двойного кобальтита. Результаты работы свидетельствуют об эффективности методов рентгеновской спектроскопии для исследования воздействия интенсивных пластических деформаций на оксиды на начальной стадии процесса, когда стандартные методы рентгеновской дифракции еще не детектируют образование новых фаз. Найденные закономерности влияния пластической деформации на зарядовые состояния ионов кобальта в GdBaCo<sub>2</sub>O<sub>5.5</sub> могут быть использованы для управления технологическими процессами получения наноструктурированных образцов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14–02–00432), Уральского отделения РАН (проекты № 12–М–23–2032 и № 14–2–МП–247) и в рамках двусторонней программы «Российско–Германская лаборатория на BESSY».

### Процессы кристаллизации в тонких пленках сплава типа Finemet

Михалицына Е.А.<sup>1</sup>\*, Катаев В.А.<sup>1</sup>, Лепаловский В.Н.<sup>1</sup>, Курляндская Г.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Университет Страны Басков, Бильбао, Испания \*e-mail: evgenia.mihalitsyna@gmail.com

Сплав Finemet (Fe<sub>73.9</sub>Nb<sub>3.1</sub>Cu<sub>0.9</sub>Si<sub>13.2</sub>B<sub>8.9</sub>), преимущественно в форме лент, широко известен благодаря своим превосходным магнитомягким свойствам. Магнитомягкие свойства реализуются за счет формирования особого структурного состояния, которое представляет собой нанокристаллические зерна со средним диаметром порядка 10–20 нм, расположенные в остаточной аморфной матрице [1]. В настоящее время фундаментальный и прикладной интерес представляет тонкопленочное состояние сплава. Тонкие пленки сплава Finemet имеют потенциал технического приложения в магнитной сенсорике, например на основе эффекта гигантского магнитного импеданса [2].

Объектами данного исследования являлись тонкие пленки модифицированного сплава Finemet состава Fe<sub>72.5</sub>Cu<sub>1.1</sub>Nb<sub>2</sub>Mo<sub>1.5</sub>Si<sub>14.2</sub>B<sub>8.7</sub> толщиной 100 и 200 нм, полученные методом высокочастотного распыления на кремниевые подложки. Проведенные исследования показывают ряд особенностей структурных и магнитных свойств тонкопленочного состояния сплава по сравнению с ленточным. В ходе работы методом рентгеновской дифракции была исследована структура пленок в исходном состоянии и после отжигов при температурах 350, 450, 550°C в течение часа. Отжиги проводились с целью формирования оптимального наноструктурного состояния для достижения магнитомягких свойств.

Для пленки толщиной 200 нм, отожженной при температуре 550°С, прошел процесс кристаллизации с образованием зерен, и размер зерен, по данным рентгеноструктурного анализа, составил порядка 45 нм. Пленка толщиной 100 нм, отожженная при той же температуре, представляла собой преимущественно аморфную матрицу с кристаллитами порядка 5 нм. Структура пленочных образцов после отжигов при более низких температурах 350 и 450°С соответствовала аморфной матрице с включениями зерен размером менее 5 нм.

С целью более детального изучения процессов кристаллизации в тонких пленках были проведены рентгеноструктурные исследования образцов в процессе их нагрева. Результаты исследований показали, что для пленки толщиной 200 нм кристаллизация начинается при более низких температурах и проходит с формированием зерен большего размера по сравнению с пленкой толщиной 100 нм, что находится в согласии с сообщенными ранее результатами.

Работа выполнена при поддержке проекта № 1362 Министерства образования и науки Российской Федерации.

1. Herzer G., Handbook of Magnetic Materials 10, 415 (1997).

2. Васьковский В.О., Савин П.А., Волчков С.О. и др., ЖТФ **83**(1), 110 (2013).

# Парные корреляции в бидисперсной магнитной жидкости в отсутствии внешнего магнитного поля

Нехорошкова Ю.Е.\*, Елфимова Е.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: julechka.n@gmail.com

Магнитная жидкость (феррожидкость) — нанодисперсная коллоидная система, основу которой составляют частицы магнетита с размерами порядка 10 нм и жидкость–носитель. Для обеспечения агрегативной устойчивости магнитную жидкость стабилизируют с помощью поверхностно–активных веществ (ПАВ).

Поскольку реальные феррожидкости являются полидисперсными по своему гранулометрическому составу, требовалось определить аналитическое выражение для парной функции распределения (ПФР) и структурного фактора рассеяния (СФ) для бидисперсной модели магнитной жидкости. Эти функции дают возможность исследовать влияние полидисперсности на структурные свойства феррожидкостей. Построенная теория сравнивается с результатами компьютерного моделирования.

Используя теоретический подход, было показано, что магнитная жидкость чувствительна к появлению полидисперсности в системе. Было проанализировано типичное поведение ПФР и СФ в зависимости от гранулометрического состава в системе. Полученные данные хорошо согласуются с результатами компьютерного моделирования [1]. Также определены закономерности в поведении СФ в зависимости от гранулометрического состава феррожидкостей в нулевом магнитном поле.

1. Нехорошкова Ю.Е., Гольдина О.А., Кэмп Ф.Дж., Елфимова Е.А., Иванов А.О., Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики **145** (2014).

### Низкотемпературная теплоемкость разупорядоченных углеродных нанотрубок

Пономарев А.Н.<sup>1\*</sup>, Бобенко Н.Г.<sup>1</sup>, Егорушкин В.Е.<sup>1</sup>, Мельникова Н.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия <sup>2</sup>Томский государственный университет, Томск, Россия \*e-mail: alexpon1981@rambler.ru

Теплоемкость одностенных и многостенных углеродных нанотрубок (УНТ) детально исследована как теоретически, так и экспериментально [1–3]. Показано, что при температуре выше 100 К теплоемкость удовлетворительно описывается фононным вкладом [1]. Однако в области низких температур (ниже 100 К) температурная зависимость теплоемкости C(T) нелинейна и характеризуется перегибами и скачками в нанотрубках различной структуры [2,3]. Цель данной работы — показать, что аномальное низкотемпературное поведение теплоемкости неупорядоченных УНТ имеет электронную природу и связано с электронами, участвующими в структурной перестройке.

Полученное нами выражение для электронной теплоемкости углеродных нанотрубок имеет вид:

$$C = \frac{2\pi^2 k^2 T}{3} \left( \nu_0 + \frac{8\hbar (1 + 1.5BT^{1/2})}{d(a\gamma_0)^2 \tau_0} \sqrt{1 + \frac{\beta^2}{\tau_0^2} \left(1 + BT^{1/2}\right)^2} \right),\tag{1}$$

где  $v_0 = p_0/(\pi^2\sqrt{3}a\gamma_0\hbar^2)\sqrt{p_0^2 - (2\hbar/3d)^2}$  — плотность электронных состояний (ПЭС) на уровне Ферми в бездефектной трубке [4],  $\beta = \sqrt{3}\pi\hbar d a^{-1}\gamma_0^{-1}$ , a = 0.246 нм — постоянная решетки и d — диаметр нанотрубки,  $\gamma_0 = 2.9$  эВ,  $\tau_0$  — время релаксации электронов, рассеивавшихся только на примесях, и наконец,  $B = 0.35\alpha(T)$ , где  $\alpha$  — параметр ближнего порядка [5], который описывает тип локальной структурной неоднородности.

Линейные по температуре вклады определяются ПЭС бездефектной трубки (первое слагаемое) и рассеянием электронов на примеси (второе слагаемое при B = 0, что возможно, если сумма параметров ближнего порядка равна нулю). Нелинейная зависимость низкотемпературной теплоемкости определяется нелинейной ПЭС трубки со структурным ближним беспорядком. ПЭС также явно зависит от концентрации чужих атомов, параметра ближнего порядка, диаметра трубок и импульса Ферми ( $p_0$ ), определяя соответствующие зависимости электронной теплоемкости. При этом, если от диаметра теплоемкость фактически не зависит, то импульс  $p_0$  оказывает существенное влияние на величину теплоемкости.

Таким образом, показано, что низкотемпературные аномалии теплоемкости УНТ не связаны с изменением размерности атомных колебаний, а определяются электронами, рассеивающимися на точечных дефектах и участвующими в образовании нового ближнего порядка при понижении температуры. Установление этого порядка при переходе «расслоение–упорядочение» может происходить как «резонансная» конденсация, и вклады в электронную теплоемкость и энтропию при данном процессе будут отрицательными. Кроме того, в рамках развиваемой нами модели оказалось возможным рассчитывать параметры ближнего порядка и их температурное поведение, имея экспериментальные данные по теплоемкости разупорядоченных углеродных нанотрубок.

- 1. Hone J., Topics Appl. Phys. 80, 273 (2001).
- 2. Bagatskii M.I., Barabashko M.S., Sumarokov V.V., Low. Temp. Phys. 39, 568 (2013).
- 3. Jorge G.A., Bekeris V., Escobar M.M., CARBON 48, 525 (2010).
- 4. Bobenko N.G., Egorushkin V.E., Melnikova N.V., Ponomarev A.N., Physica E 60, 11 (2014).
- 5. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А., Ближний порядок в твердых растворах, «Наука» (1977).
## Зависимость межслойного обмена в слоистой структуре Fe/Cr/Gd от толщины прослойки Cr

Дровосеков А.Б.<sup>1</sup>, Крейнес Н.М.<sup>1</sup>, Савицкий А.О.<sup>1\*</sup>, Кравцов Е.А.<sup>2</sup>, Благодатков Д.В.<sup>2</sup>, Рябухина М.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, Москва, Россия <sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: sao1992@mail.ru

Целью данной работы было исследование межслойного взаимодействия в магнитной слоистой системе Fe/Cr/Gd в зависимости от толщины прослойки Cr. Магнитная система Fe/Gd хорошо изучена. Она обладает богатой фазовой H-T диаграммой [1], что связано с антиферромагнитным межслойным обменным взаимодействием Fe и Gd. Ранее система Fe/Cr/Gd изучалась в работе [2], однако однозначного вывода о зависимости межслойного взаимодействия от толщины прослойки Cr, основываясь на этой работе, сделать нельзя.



Рис. 1. Зависимость межслойного взаимодействия между слоями Fe и Gd от толщины прослойки Cr. Закрашенные символы соответствуют билинейному обмену, пустые — биквадратичному, треугольникам соответствуют данные, полученные для образцов на кремниевой подложке, кружкам — на стеклянной подложке.

В настоящей работе исследовалась серия сверхрешеток  $[Fe(35 \text{ Å})/Cr(t)/Gd(50 \text{ Å})/Cr(t)]_{12}$  с различными толщинами Cr  $t = 4 \div 30$  Å. Образцы были получены методом магнетронного напыления на кремниевых и стеклянных подложках и имеют поликристаллическую структуру. Наличие слоистой структуры подтверждается данными рентгеновской рефлектометрии. Исследование системы Fe/Cr/Gd проводилось методами СКВИД магнитометрии и ферромагнитного резонанса (ФМР) в диапазоне температур 4–300 К.

Данные измерений статической намагниченности и спектры ФМР демонстрируют различное поведение кривых намагничивания для образцов с различными толщинами Cr. Результаты измерений намагниченности образцов с тонкими прослойками Cr (t < 10 Å) свидетельствуют о наличии межслойного взаимодействия между слоями Fe и Gd антиферромагнитного типа и о его уменьшении с увеличением толщины прослойки Cr. Данные измерений намагниченности для образцов с толстыми прослойками Cr (t > 10 Å) не позволяют судить о наличии обменного взаимодействия между слоями Fe и Gd. Вместе с тем данные ФМР свидетельствуют о наличии межслойного взаимодействия в области t > 10 Å. Причем при толщинах Cr в окрестности 15 Å наблюдается обменное взаимодействие ферромагнитного знака, а в окрестности 20 Å — антиферромагнитного знака. Величина межс-

лойного взаимодействия определялась в результате моделирования структуры Fe/Cr/Gd в рамках модели среднего поля, учитывающей помимо билинейного обмена вклад биквадратичного взаимодействия. На рис. 1 приведена зависимость констант межслойного взаимодействия от толщины прослойки Cr.

1. Camley R.E. and Stamps R.L., J. Phys: Condens. Matter 5, 3727 (1993).

2. Sanyal B., Antoniak C., Burkert T., et al., Phys. Rev. Lett. 104, 156402 (2010).

#### Исследование термодинамических свойств бидисперсной феррожидкости

Соловьева А.Ю.\*, Елфимова Е.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: anita\_zy@mail.ru

В настоящей работе проведено исследование термодинамических свойств бидисперсной феррожидкости аналитически и методом Монте–Карло [1]. Бидисперсная модель содержит основные характерные особенности реальной полидисперсной феррожидкости и одновременно является удобной для моделирования.

В модельной системе предполагается наличие двух фракций: мелких и крупных частиц, которые отличаются своим диаметром  $d_{S(L)}$  и магнитным моментом  $m_{S(L)}$ . Интенсивность диполь-дипольного взаимодействия между частицами определяется параметром  $\lambda_{ij} = 8m_i m_j / (d_i + d_j)^3 kT$ , где  $i, j \in \{S, L\}, kT$  — тепловая энергия.

Теоретический подход основан на вычислении функции свободной энергии Гельмгольца, поскольку она является универсальным параметром и позволяет рассчитать любые свойства данной термодинамической системы. Классическое представление вклада диполь–дипольных взаимодействий в свободную энергию Δ*F* — это вириальный ряд по степеням общей объемной концентрации φ:

$$\Delta F = -NkT \sum_{p=1}^{\infty} B_{p+1} \varphi^p.$$
<sup>(1)</sup>

Вириальные коэффициенты  $B_p$  учитывают межчастичные диполь–дипольные взаимодействия в группах из p феррочастиц. В случае бидисперсной феррожидкости вириальные коэффициенты в отсутствие внешнего магнитного поля зависят от параметров интенсивности диполь–дипольных взаимодействий  $\lambda_{ij}$ , гранулометрического состава  $\varphi_S/\varphi$  и отношения диаметров частиц  $d_S/d_L$ . В данной работе были найдены коэффициенты  $B_2$  и  $B_3$  в виде ряда по степеням параметров  $\lambda_{ij}$  до 4–го и 3–го порядков соответственно.

Исследуемый вириальный ряд является знакопеременным и медленно сходящимся, поэтому было использовано обратное кумулянтное преобразование для выражения свободной энергии, которое показало свою эффективность при изучении монодисперсной системы дипольных твердых сфер.

Для определения области применения полученных аналитических формул проводилось компьютерное моделирование бидисперсной системы дипольных твердых сфер с использованием периодических граничных условий и метода самосогласованного поля [2] для учета дальнодействующих диполь–дипольных взаимодействий. Получены численные значения давления, фактора сжимаемости и свободной энергии Гельмгольца.

Сравнение теоретических кривых с результатами компьютерного эксперимента показало область применимости построенной теории и эффективность использования обратного кумулянтного преобразования. Для объемной концентрации  $\varphi \leq 0.3$  наблюдается отличное согласие теории и данных компьютерного моделирования.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и образования РФ, соглашение № 02.А03.21.0006 от 27.03.2013.

1. Allen M., Tildesley D., Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, Oxford (1987).

2. Neumann M., Molecular Physics 50, 841 (1983).

#### Исследование лазерного факела, возникающего при испарении мишеней из Nd : Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> различной прозрачности излучением волоконного иттербиевого лазера

Осипов В.В.<sup>2</sup>, Платонов В.В.<sup>2</sup>, <u>Тихонов Е.В.<sup>1,2</sup>\*</u>, Лисенков В.В.<sup>1,2</sup>, Подкин А.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: tihonovegor1992@mail.ru

Сегодня актуально создание лазерных керамик на основе слабоагломерированных нанопорошков Nd :  $Y_2O_3$ , получаемых путем испарения твердой мишени излучением мощного лазера и последующей конденсации её паров в воздухе. При использовании 600 Вт импульсно-периодического CO<sub>2</sub>–лазера производительность получения наночастиц Nd :  $Y_2O_3$  составляет 30 г/час. Они имеют сферическую форму и средний размер  $\approx 14$  нм. Сегодня появились волоконные иттербиевые лазеры ( $\lambda = 1.07$  мкм) с более высоким КПД (до 25%). При использовании такого лазера с мощностью непрерывного излучения 600 Вт для получения наночастиц Nd : YAG поверхность мишени становилась неровной и производительность снижалась [1]. По нашему мнению, это происходит из–за прозрачности оплава, образующегося на мишени, для излучения 1.07 мкм. Целью данной работы является исследование получения нанопорошка Nd : Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с помощью волоконного лазера, работающего в непрерывном режиме.

Синтез нанопорошка Nd:Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> проводился в воздухе (давление 0.75 бар) при скорости его прокачки 45 м/с. Волоконный лазер ЛС-07-Н генерировал непрерывное излучение мощностью 600 Вт. В первых опытах излучение фокусировалось линзой с фокусом 200 мм ( $I = 1.2 \text{ MBt/cm}^2$ ), скорость перемещения луча по мишени была равна 35 см/с. При испарении мишень покрывалась оплавом, толщина и прозрачность которого были различны на разных участках мишени. Из-за неоднородного испарения на поверхности мишени формировались неровности, наклонные стенки которых испарялись медленнее, чем дно. Кроме того, на стенках осаждались наиболее крупные капли. В итоге на мишени возник лес из сталагмитов высотой 6-8 мм, что снизило производительность. В среднем она равнялась 15–16 г/час, а выход нанопорошка составил 10% от исходной массы мишени. Улучшить режим испарения мишени можно, уменьшив глубину трека и толщину оплавленного слоя путём увеличения размера лазерного пятна и скорости его перемещения. При увеличении скорости движения луча до 81 см/с производительность получения порошка и его массовый выход выросли до 21 г/час и 18 масс. % соответственно. При использовании линзы с фокусом 400 мм эффективность испарения мишени выросла во всем диапазоне скоростей. Наилучший режим испарения реализовался при скорости 85 см/с — производительность была 23 г/час, выход нанопорошка составил 22 масс. %. Полученный в этом режиме порошок Nd : Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> на 99.8 масс. % состоял из сферических наночастиц с размерами 2-40 нм и на 0.3 масс. % из крупных частиц размерами 0.2-30 мкм. Удельная поверхность порошка составила 68 м<sup>2</sup>/г. Функции распределения по размерам наночастиц, полученных волоконным и СО₂–лазерами, фактически совпали, как и средние размеры наночастиц (≈ 14 нм). Причина этого в том, что в обоих случаях давление воздуха было примерно одинаковым (~1 атм), т.е. условия охлаждения и конденсации паров тоже были одинаковыми.

Настоящая работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 13–08–00529– а и грант № 14–08–00181–а).

1. Котов Ю., Саматов О., Иванов М., Мурзакаев А., Медведев А., ЖТФ 81, 65 (2011).

## Получение нанопорошков Nd : Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с помощью волоконного иттербиевого лазера, работающего в непрерывном режиме

Осипов В.В.<sup>2</sup>, Платонов В.В.<sup>2</sup>, <u>Тихонов Е.В.<sup>1,2\*</sup></u>, Лисенков В.В.<sup>1,2</sup>, Подкин А.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: tihonovegor1992@mail.ru

Актуальной задачей является исследование получения нанопорошка Nd :  $Y_2O_3$  путем испарения твердой мишени излучением волоконного иттербиевого лазера и последующей конденсации её паров в воздухе. Использование этого лазера сразу же вызвало вопросы. При получении порошка Nd : YAG волоконным лазером мощностью 600 Вт поверхность мишени стала неровной, что снизило производительность [1]. В наших опытах производительность получения таким же лазером наночастиц Nd :  $Y_2O_3$  из–за образования неровностей оказалась вдвое меньше, чем для 600 Вт импульсно– периодического  $CO_2$ –лазера. В [1] считают, что неровности образуются из–за возникновения «кинжального» проплавления мишени. На наш взгляд, одной из причин их появления является образование на мишени полупрозрачного для излучения волоконного лазера (1.07 мкм) оплава. Целью этой работы явилось исследование испарения волоконным лазером мишеней из Nd :  $Y_2O_3$  различной прозрачности.

В опытах лазер ЛС-07-Н генерировал одиночные прямоугольные импульсы излучения различной мощности (100 ÷ 700 Вт) и длительности (0.1 ÷ 1.4 мс), которые фокусировались на мишень линзой с фокусом 200 мм или 400 мм. После воздействия импульса излучения мощностью 700 Вт  $(I = 0.4 \cdot 10^6 \text{ Br/cm}^2)$  из полупрозрачной мишени ( $\alpha_{\lambda} = 23 \text{ сm}^{-1}$ ) удаляется 67 мкг вещества и образуется кратер глубиной ~ 175 мкм. Это больше, чем в случае импульса СО<sub>2</sub>-лазера (12 мкг и ~ 30 мкм) той же энергии (1 Дж), но большей плотности мощности (1.0 · 10<sup>6</sup> Вт/см<sup>2</sup>). В случае волоконного лазера некоторые кратеры имели в устье вместо бруствера скол. Главным отличием испарения полупрозрачной мишени ( $\alpha = 23 \text{ см}^{-1}$ ) от испарения непрозрачной ( $\alpha = 1.7 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ ) при прочих равных условиях стало почти 8-кратное увеличение задержки появления лазерного факела. В случае полупрозрачной мишени только 5 импульсов излучения из 28 привели к образованию кратера, а для непрозрачной мишени кратер возникал при каждом лазерном импульсе. Путём скоростной съемки обнаружено, что для всех мишеней в первые 100 ÷ 200 мкс факел состоит из пара. Однако затем появляется множество капель, а доля пара снижается. При этом снижается интенсивность свечения факела, и появляются нерегулярные вспышки. Полученные данные позволили предложить следующую модель. Излучение волоконного лазера поглощается в Nd : Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> на дефектах кристаллической структуры и порах, концентрация которых и определяет прозрачность мишени. Это приводит к их нагреву и нагреву близлежащих областей, в которых с ростом температуры растёт показатель поглощения. В результате образуется волна нагрева, распространяющаяся к поверхности мишени. При достижении в ней температуры плавления возникает скачок давления, который приводит к разрушению поверхности мишени и разлёту множества капель. В дальнейшем образуется глубокий кратер, скорость испарения вещества из которого снижается из-за уменьшения плотности мощности излучения на наклонных стенках. При этом растёт доля расплава, удаляющаяся из кратера под давлением пара.

Настоящая работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 13–08–00529– а и грант № 14–08–00181–а).

1. Иванов М., Котов Ю., Комаров В., Саматов О., Сухов А., Фотоника 3, 18 (2009).

## Аттестация пленочных наноструктур на основе FeNi/Cu компонент с высоким магнито–импедансным эффектом

Членова А.А.\*, Курляндская Г.В., Волчков С.О., Лепаловский В.Н.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: anniaally@gmail.com



Рис. 1. Сравнение величины  $\Delta Z/Z$  для пленочных наноструктур при двух повторных измерениях: П1, П2 для полосовых структур и М1, М2 для меандров.

Детекторы слабых магнитных полей широко используются в технических и биомедицинских приложениях. В последние годы был достигнут значительный прогресс в разработке датчиков сверхслабых магнитных полей, работа которых основана на явлении гигантского магнитного импеданса (МИ), способных конкурировать с классическими детекторами [1]. Магнитоимпедансный эффект - это изменение полного электрического сопротивления ферромагнитного проводника при протекании по нему переменного тока I<sub>ac</sub> высокой частоты под действием внешнего магнитного поля [1]. В данной работе было проведено сравнительное исследование МИ пленочных элементов в виде полосовых структур (П) и меандров (М) — орнамента в виде ломаной под прямом углом линии. Измерения МИ проводились в конфигурации «микрострайп» на установке Agilent HP e4991А в частотном диапазоне 1-400 МГц. В качестве полосовых структур были выбраны многослойные пленочные эле-

менты [FeNi(70 нм)/Cu(3 нм)]<sub>3</sub>/FeNi(70 нм)/Cu(500 нм)/[FeNi(70 нм)/Cu(3 нм)]<sub>3</sub>/FeNi(70 нм), приготовленные путем магнетронного распыления через маски. Меандры были созданы на основе структуры [FeNi(100 нм)/Cu(3 нм)]<sub>4</sub>/FeNi(100 нм)/Cu(3 нм)]<sub>4</sub>/FeN

Ofmanar		$C(\Lambda \mathbf{Z}/\mathbf{Z})$ or	Частота для	Рабочий	Площадь полезной	
Ооразец	$\Delta Z/Z, \%/J$	$S(\Delta Z/Z),\%$	$(\Delta Z/Z)_{ m max}$ , МГц	интервал, Э	поверхности, мм <sup>2</sup>	
П	49	6	380	3.5–10.5	5	
М	80	17	50	1.5-4.0	19.2	

Таблица 1. Основные функциональные характеристики для полосовых структур и меандров.

Работа выполнена в КЦП «Физика, технологии и применение наноструктурированных магнитных материалов».

1. Курляндская Г.В., де Кос Д., Волчков С.О., Дефектоскопия 6, 13 (2009).

# ФИЗИКА НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР

#### Обнаружение релаксационного поглощения ультразвука в кристалле ZnSe : Cr в сильных магнитных полях

Аверкиев Н.С.<sup>1\*</sup>, Барышников К.А.<sup>1</sup>, Берсукер И.Б.<sup>2</sup>, Гудков В.В.<sup>3</sup>, Жевстовских И.В.<sup>3,4</sup>, Коростелин В.Ю.<sup>5</sup>, Ландман А.И.<sup>5</sup>, Zherlitsyn S.<sup>6</sup>, Монахов А.М.<sup>1</sup>, Сарычев М.Н.<sup>3</sup>, Yasin S.<sup>6</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
 <sup>2</sup>Техасский университет в Остине, Остин, Техас, США
 <sup>3</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
 <sup>4</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия
 <sup>5</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
 <sup>6</sup>Центр им. Гельмгольца Дрезден-Россендорф, Дрезден, Германия
 \*e-mail: mak-sarychev@yandex.ru

Ультразвуковые исследования кристаллов II–VI : 3d (см. [1] и ссылки в этой работе) показали, что эффект Яна–Теллера проявляется в виде пика затухания  $\alpha$  и минимума фазовой скорости  $\nu$  в температурных зависимостях. В работе [2] экспериментально исследовались зависимости  $\alpha$  и  $\nu$  от магнитного поля при T = 2 К в кристалле ZnSe :  $Cr^{2+}$  с концентрацией примеси  $n = 3.8 \times 10^{18}$  см<sup>-3</sup>. Это соединение имеет структуру цинковой обманки с тетраэдрическим окружением ионов  $Cr^{2+}$  в конфигурации  ${}^{5}T_{2}(e^{2}t^{2})$  в сильноспиновом основном состоянии. Новые эксперименты, кроме аномалий поглощения ультразвука в слабых магнитных полях, показали изменения поглощения в полях *B* более 5 T при фиксированных температурах в диапазоне от 1.4 до 20 К.

Установлено, что магнитное поле, ориентированное вдоль волнового вектора, влияет только на параметры распространения волны, поляризованной вдоль [110], явно указывая на то, что аномалии связаны с ян–теллеровским комплексами.

В данной работе мы приводим результаты экспериментов и теоретическое описание релаксационного поглощения ультразвука (см. рис. 1). Показано, что зависимость поглощения от магнитного поля появляется вследствие изменения с магнитным полем заселенности нижних энергетических уровней примесных центров  $Cr_{Zn}4Se$ , сформированных с учетом эффекта Яна–Теллера и спин–орбитального взаимодействия.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 12–02–00476–а), фонда Династия



Рис. 1. Экспериментальное (сплошные линии) и расчетное (штриховые линии) поглощение ультразвука при различных температурах.

(грантополучатель Барышников К.А.), программы повышения конкурентоспособности Уральского федерального университета, программы Р220 правительства РФ (проект № 14.Z50.31.0021).

1. Gudkov V.V., Bersuker I.B. et al., J. Phys.: Condens. Matter 23, 115401 (2011).

2. Gudkov V.V., Bersuker I.B., Yasin S., Zherlitsyn S., Zhevstovskikh I.V., Mayakin V.Yu., Sarychev M.N., Suvorov A.A., Moscow International Symposium on Magnetism, Book of Abstracts **177**, 22PO–J–11 (2011).

#### Электрические и гальваномагнитные свойства полуметаллического ферромагнетика Co<sub>2</sub>FeSi

Белозерова К.А.<sup>1</sup>\*, Марченков В.В.<sup>1</sup>, Коуров Н.И.<sup>1</sup>, Наумов С.В.<sup>1</sup>, Телегин С.В.<sup>1</sup>, Попова О.Е.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: klara.belozerova@gmail.com

Полуметаллические ферромагнетики выделяются среди других сплавов Гейслера тем, что в их электронном спектре на уровне Ферми  $E_{\rm F}$  реализуется энергетическая щель в одной из подполос, отличающихся направлением спинов электронов относительно вектора спонтанной намагниченности [1]. Эта особенность электронного спектра выявляется в результате «первопринципных» зонных расчетов и экспериментально обнаруживается при измерении оптических характеристик. Вследствие значительных изменений спектральных параметров при переходе из ферромагнитного в парамагнитное состояние она должна проявляться и в поведении других электронных свойств данных материалов. В частности, следует ожидать наличие «щелевых» особенностей в электронных транспортных свойствах.

Проведены исследования намагниченности M, электросопротивления  $\rho$ , магнитосопротивления  $\rho_{xx}$  и эффекта Холла  $\rho_H$  поликристалла полуметаллического ферромагнитного сплава Гейслера Co<sub>2</sub>FeSi в интервале температур 4.2–350 К и в магнитных полях до 10 Т. Обнаружена положительная квадратичная температурная зависимость  $\rho$  и смена знака  $\rho_{xx}$  с положительного при низких температурах на отрицательный при T > 100 К. Эти особенности поведения электронного транспорта рассматриваются в рамках двухтоковой модели проводимости [2], учитывающей наличие энергетической щели в электронном спектре сплавов вблизи уровня Ферми. Для однозначной интерпретации полученных результатов, в частности избавление от эффектов, связанных с рассеянием носителей заряда на межзеренных границах, необходимы исследования на монокристаллических образцах.

Поэтому нами был выращен и аттестован монокристалл Co<sub>2</sub>FeSi. Рентгеноструктурный анализ показал, что это образец со структурой  $L2_1$  и параметром решетки 5.65 Å. Предварительные измерения намагниченности показали, что при комнатной температуре намагниченность насыщения монокристалла составляет величину около 6µ<sub>B</sub>/form. un. Это хорошо совпадает с литературными данными [3]. Отношение сопротивлений монокристалла  $\rho_{297K}/\rho_{4.2K}$  составляют величину около 5.5, что также свидетельствует о достаточно высоком качестве монокристалла. Таким образом, выращенный нами монокристалл Co<sub>2</sub>FeSi является достаточно чистым и совершенным, с параметрами, соответствующими известным литературным данным. В дальнейшем будет проведено исследование монокристалла.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 12–02–00271), программы ФНИ ОФН РАН (проект № 12–T–2–1011), НШ–6172.2012.2 и проекта № 14–2–НП–223.

1. Ирхин В.Ю., Кацнельсон М.И., УФН **164**, 705 (1994).

2. Щербаков А.С., Коуров Н.И., Циовкин Ю.Н., ФТТ 27, 1685 (1985).

3. Bombor D., Blum C.G.F., Volkonskiy O. et al., Phys. Rev. Lett. 110, 066601 (2013).

#### Влияние «псевдовращения» на поведение изохорной теплопроводности

Карачевцева А.В.\*, Саган В.В., Константинов В.А., Ревякин В.П.

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАНУ, Харьков, Украина \*e-mail: zvonaryova@ilt.kharkov.ua

В качестве объекта исследования был выбран твердый тетрагидрофуран — C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O (THF). Измерения изохорной теплопроводности производились на образцах с различной плотностью в температурном интервале от 125 К и до температуры плавления, а также при давлении насыщенного пара. Различие в температурной зависимости изобарной и изохорной теплопроводности объясняется тепловым расширением.

Тетрагидрофуран это органическое гетероциклическое соединение. Согласно калориметрическим данным, он имеет одну кристаллографическую модификацию. Тетрагидрофуран плавится при 164.9 К; энтропия плавления составляет  $\Delta S_p/R = 7.07$ , что указывает на высокую степень упорядоченности [1]. Псевдовращение можно описать как колебание атомов вблизи положения равновесия, которое происходит с большой амплитудой, эти колебания последовательно передаются по циклу, что и напоминает колебательное движение [2]. В тетрагидрофуране псевдовращение возникает вследствие уменьшения напряжения угловых сил, обусловленных угловыми связями в скелете молекулы и торсионными силами, которые действуют на отталкивание водород–водород связей [3–5].

Изохорная теплопроводность всех исследованных образцов уменьшается с температурой по более слабой зависимости, нежели по закону 1/T. Рассчитанный из экспериментальных данных коэффициент Бриджмена  $g = -(\partial \ln \kappa / \partial \ln V)_T$  составляет  $7.7 \pm 0.6$  при 160 К. Показано, что экспериментальные данные могут быть описаны в рамках модифицированной дебаевской модели теплопроводности с учетом переноса тепла как низкочастотными фононами, так и «диффузными» модами. Расчетные параметры модели близки по значению к тем, которые наблюдаются в ориентационно–упорядоченных фазах других молекулярных кристаллов. В результате обработки экспериментальных данных было показано, что псевдовращение не оказывает существенного влияния на теплопроводность.

- 1. Lebedev B.V., Rabinovich I.B., Milov V.I., Lityagov V.Ya., J. Chem. Thermodynamics 10, 321 (1978).
- 2. Дашевский В.Г., Конформационный анализ органических молекул, Москва, Химия (1982).
- 3. Harris D.O., Engerholm G.G., Tolman C.A., Luntz A., Keler R.A., Kim H., Gwinn W.D., J. Chem. Phys. 50, 2438 (1969).
- 4. Lafferty W.J., Robbinson D.W., Louis R.W.St., J. Chem. Phys. 42, 2915 (1965).
- 5. Melnik D.G., Gopalakrishnan S., Miller T.A., J. Chem. Phys. 118, 3589 (2003).

#### ФОНОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ПЛЕНКАХ С ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЕМ ФАЗЫ

Куликовский А.В.

### Тарусский филиал Института общей физики им. А.М. Прохорова, Таруса, Россия e-mail: kuliko@ran.gpi.ru

Экспериментально исследованы неравновесные свойства широких сверхпроводящих пленок олова в резистивном токовом состоянии. В данном случае свойства пленок определяются формированием и динамикой, на фоне вихревого состояния, линий проскальзывания фазы (ЛПФ) — двумерных аналогов центров проскальзывания фазы в узких каналах. Параметры электронной системы сверхпроводника осциллируют в активной области проскальзывания фазы. В частности, абсолютное значение параметра порядка периодически обращается в ноль. В таких неравновесных условиях можно ожидать электромагнитное и фононное излучение в результате проскальзывания фазы.

В серии экспериментов одновременно записывались вольтамперные характеристики (ВАХ) широкой пленки в резистивном состоянии и регистрировался тепловой поток от пленки в окружающую среду (с помощью температурных датчиков и Джозефсоновских контактов Nb–NbO<sub>x</sub>–Pb, расположенных на обеих гранях сапфировой подложки).



Рис. 1. Регистрируемый тепловой поток от пленки с линиями проскальзывания фазы.

Обнаружен аномальный скачок регистрируемого (на противоположной грани подложки) теплового потока от пленки — при напряжениях, соответствующих разрушению структуры ЛПФ вследствие развития тепловой неустойчивости. На рис. 1 представлена экспериментальная зависимость при температуре гелиевой ванны 3.776 К (критическая температура пленки  $T_c =$  3.91 К). Здесь величина теплового потока выражена в относительных единицах, связанных с показаниями термодатчика.

Экспериментальные результаты проанализированы в рамках модели [1], рассматривающей динамический режим активных областей проскальзывания фазы и показывающей, что любое изменение параметра порядка во времени должно сопровождаться обменом фононами между сверхпроводником и термостатом.

Сравнение экспериментальных значений скачка теплового потока  $\Delta E$  с величинами, полученными расчетным путем, показало сходство поведения двух зависимостей. Максимум величины  $\Delta E$  достигается при температурах, где структура ЛПФ наиболее устойчива. Для приведенного примера  $\Delta E$  соответствует примерно 4 мК.

Таким образом, экспериментально наблюдаемое локальное уменьшение теплового потока от пленки в момент разрушения структуры ЛПФ может служить косвенным подтверждением существующих представлений о динамике процессов проскальзывания фазы в широких сверхпроводящих пленках. Исчезновение ЛПФ как источника высокочастотных фононов приводит к изменению характера распространения фононных потоков и перераспределению теплового баланса в системе пленка– термостат.

1. Гулян А.М., Жарков Г.Ф., Сверхпроводники во внешних полях (неравновесные явления), Наука (1990).

## Квантовый магнитотранспорт в структурах *n*–InGaAs/GaAs до и после инфракрасного освещения

Арапов Ю.Г., Гудина С.В., Неверов В.Н., Подгорных С.М., Савельев А.П.\*, Якунин М.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: saveliev@imp.uran.ru

Полупроводниковые структуры типа *n*–InGaAs/GaAs с двойными квантовыми ямами в течение нескольких лет являются объектами исследования в силу ряда факторов [1, 2]. Особенно привлекает многих исследователей явление, связанное с эффектом остаточной фотопроводимости (ОФ) в этих гетеросистемах. Хотя этот эффект уже исследован довольно широко, до настоящего времени нет однозначной модели, описывающей все физические механизмы, которые могут быть задействованы. Результаты первых работ по эффекту ОФ, проделанных на полупроводниках, легированных кремнием, до сих пор обсуждаются.



Рис. 1. Температурные зависимости сопротивления в нулевом магнитном поле для образца с исходной концентрацией (
) и после максимальной засветки (
).

Освещение полупроводниковых структур при низких температурах может вызвать изменение концентрации носителей заряда, и эти изменения сохраняются после отключения подсветки [3]. Считается, что инфракрасная подсветка ( $\lambda$  от ~ 0.74 мкм до 1–2 мм) вызывает в *n*–InGaAs/GaAs ОФ, связанную с присутствием в структуре глубоких донорных центров, которые захватывают часть электронов проводимости и высвобождают их под действием освещения.

Измерены магнитополевые зависимости компонент тензора сопротивления при фиксированных температурах в структурах *n*–InGaAs/GaAs, симметрично легированных в барьерах Si, до и после низкотемпературного освещения инфракрасным излучением в диапазоне полей B = 0-12 Тл и температур T = 0.4-80 К. Показано, что возникающая положительная ОФ вызывает более чем двукратное увеличение концентрации носителей заряда. Появление положительной ОФ приводит к

изменению характера температурной зависимости сопротивления (рис. 1). Показано, что это связано с вкладом температурной зависимости концентрации носителей заряда. Температурная зависимость подвижностей носителей заряда имеет различный характер до и после воздействия инфракрасным излучением.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон» № 01201463326 (проект № 14–2–НП–33) и при поддержке РФФИ (проекты № 14–02–31164 и № 14–02–00151).

- 1. Lo I., Kao M.J., Hsu W.C., Kuo K.K., Chang Y.C., Weng H.M., Chiang J.C., Tsay S.F., Phys. Rev. B 54, 4774 (1996).
- 2. Chan C.H., Wu J.D., Huang Y.S., Su Y.K., Tiong K.K., J. Appl. Phys. 106, 043523 (2009).
- 3. Cavalheiro A., da Silva E.C.F., Takahashi E.K., Quivy A.A., Leite J.R., Meneses E.A., Phys. Rev. B 65, 075320 (2002).

# Оптика и спектроскопия

## Закономерности температурного тушения фотолюминесценции гексагонального нитрида бора

<u>Henaish A.M.A.</u>\*, Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: ph\_atomic@yahoo.com

Гексагональный нитрид бора (h–BN) с шириной запрещенной зоны около 5.5 эВ является перспективным материалом для применений в оптоэлектронике и твердотельной дозиметрии [1]. Известно, что существенное влияние на радиационно–оптические свойства h–BN оказывают собственные и примесные дефекты, образующиеся на стадии синтеза. В свою очередь, понимание механизмов люминесценции, природы рекомбинационных центров и ловушек заряда в таких дозиметрических средах становится определяющим фактором при разработке детекторов ионизирующих излучений. В этой связи цель работы заключалась в исследовании закономерностей температурного тушения фотолюминесценции ( $\Phi$ Л) микрокристаллического порошка h–BN, синтезированного по плазмохимической технологии.



Рис. 1. Спектры возбуждения и свечения ФЛ при различных температурах для h–BN.

Измерения проводились с использованием люминесцентного спектрометра Perkin Elmer LS 55 с разработанной высокотемпературной приставкой [2]. Тушение ФЛ регистрировалось в спектральной области 290–650 нм при возбуждении в полосе 225 нм во время нагрева и охлаждения со скоростью 1 К/с в диапазоне 300–800 К.

На рис. 1 представлены экспериментальные спектры возбуждения и свечения ФЛ для исследуемых образцов. На основе анализа полученных данных показано, что спектры свечения ФЛ описываются суперпозицией трех компонент гауссовой формы (в энергетическом представлении) с максимумами при 345, 375 и 425 нм и имеют полосы возбуждения 225 и 240 нм. Продемонстрировано, что интенсивность ФЛ в полосах 345 и 375 нм уменьшается при увеличении

температуры и тушится до фоновых значений при 800 К. Обнаружено разгорание при изучении температурного поведения ФЛ в полосе 345 нм, которое предположительно связано с конкурирующими процессами захвата носителей заряда на систему ловушек. Обсуждаются природа регистрируемой ФЛ и механизмы температурного тушения/разгорания в рамках модельных представлений о кислород–связанных комплексах, которые формируют сложную структуру энергетических уровней в запрещенной зоне *h*–BN и обеспечивают наблюдаемое рекомбинационное свечение.

- 1. Weinstein I.A., Vokhmintsev A.S., Minin M.G., Kartashov V.V., Chernetsky I.V., Radiation Measurements **56**, 236 (2013).
- 2. Вохминцев А.С., Минин М.Г., Чайкин Д.В., Вайнштейн И.А., Приборы и техника эксперимента **3**, 139 (2014).

#### Дисперсия оптических мод тонких лево–ориентированных пленок

Дашин Н.А.\*, Конкин Д.А., Литвинов Р.В.

#### Томский университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, Россия \*e-mail: nik\_dash@mail.ru

Современная технология метаматериалов позволяет создавать на объемной подложке тонкие лево–ориентированные пленки с одновременно отрицательными значениями диэлектрической и магнитной проницаемостей в оптическом диапазоне длин волн [1]. В данном сообщении представлены результаты анализа зависимости эффективных показателей преломления *n*<sub>eff</sub> собственных оптических мод TE–типа планарного волновода с лево–ориентированной сердцевиной от длины световой волны λ.

Представленные на рисунке дисперсионные зависимости  $n_{\rm eff}(\lambda)$  рассматриваемой структуры с толщиной пленки 330 нм и относительной диэлектрической проницаемостью немагнитной подложки равной  $\varepsilon_s = 2$  рассчитаны на основе дисперсионного соотношения из работы [2] для случая типичной дисперсионной модели объемного лево–ориентированного материала с параметрами  $\omega_p = 3.46$  рад/с,  $\omega_0 = 1.63$  рад/с и F = 0.5 [3].



Рис. 1. Дисперсионные кривые быстрых и медленных мод лево–ориентированного волновода толщиной 330 нм.

Полученные зависимости лежат не только в области быстрых мод ( $\varepsilon_s^{1/2} < n_{\rm eff} < n_f, n_f$  — показатель преломления материала пленки), что характерно для обычных планарных волноводов, но и в области медленных мод  $n_{\rm eff} > \max\left(n_f, \varepsilon_s^{1/2}\right)$ , которые у обычных волноводов отсутствуют.

Другой отличительной особенностью этих зависимостей является наличие у них двух сингулярных точек. Первая из них обусловлена сингулярностью дисперсионной зависимости магнитной проницаемости левоориентированного материала пленки при частоте  $\omega_0$ . С ростом номера моды дисперсионные зависимости, приближаясь к области этой сингулярности, практически сливаются. Вторая сингулярность находится в точке  $\lambda = 1$  мкм, где эта проницаемость принимает значение равное —1. В окрестности этой точки дисперсионные кривые медленных мод рассматриваемого волно-

вода асимптотически приближаются к дисперсионным кривым поверхностных электромагнитных волн *s*-типа, которые в этой точке имеют нулевые фазовые скорости.

Еще одна особенность полученных зависимостей — это наличие у всех мод длины волны, при которой выполняется условие  $dn_{\rm eff}/d\lambda = \infty$ , соответствующее нулевой групповой скорости моды. Эта точка делит дисперсионные кривую на две ветви. Нижняя ветвь соответствует положительной групповой скорости моды (фазовая и групповая скорости имеют одинаковое направление), а верхняя отрицательной (фазовая и групповая скорости имеют противоположные направления).

Работа выполнена в рамках проекта № 2406 Министерства Образования и Науки РФ.

- 1. Dolling G. et al., Optics Letters 32, 53 (2007).
- 2. He Y., Cao Z., Shen O., Optics Communications 245, 125 (2005).
- 3. Smith D.R. et al., Phys. Rev. Lett. 84, 4184 (2000).

## Возбуждение плазмон–поляритонных мод в нерегулярных одномодовых металл–диэлектрических световодах

#### Дышлюк А.В.

#### Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, Владивосток, Россия Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия e-mail: anton\_dys@iacp.dvo.ru

Численно исследованы процессы возбуждения поверхностного плазмонного резонанса в деформированном одномодовом волоконном световоде (ВС) с металлизированной оптической оболочкой (рис. 1). Задача о распространении направляемого излучения в световоде решена методом разложения по собственным модам (Eigenmode Expansion (EME)) [1]



Рис. 1. Оптическая схема исследуемого световода: 1 — входной участок, 2 — изогнутый участок, 3 выходной участок, 4 — сердцевина, 5 — оболочка, 6 — полимерное покрытие, 7 — металлическая пленка, 8 — профиль моды изогнутого участка, 9 профиль фундаментальной моды прямого участка. На вставке — эффективный градиентный профиль эквивалентного планарного световода (n'1). в двумерной формулировке с применением методики эффективного показателя преломления (Effective Index Method) для приведения волоконного световода круглого сечения к планарному световоду с эффективным градиентным профилем показателя преломления (рис. 1, вставка 1) [2].

Определены оптимальные сочетания радиуса изгиба BC, спектрального диапазона направляемого излучения и толщины металлической пленки, при которых реализуется сильная связь между фундаментальной и плазмонполяритонной модами через посредство мод шепчущей галереи, распространяющихся в оболочке изогнутого световода. Показано, что в этом случае в спектре пропускания исследуемой структуры формируется узкий провал на резонансной длине волны, которая линейно зависит от показателя преломления (ПП) внешней среды вблизи металлической пленки, что позволяет проводить измерения ПП в спектральном режиме регистрации сигнала с чувствительностью ~ 20 мкм/ед. ПП. Показано также, что изменение коэффициента пропускания исследуемой структуры на фиксированной длине волны достигает  $\sim 60$  дБ при изменении ПП на  $\sim$ 

 $1.5 \cdot 10^{-3}$ , что позволяет проводить рефрактометрические измерения в амплитудном режиме регистрации сигнала с разрешением до  $10^{-8}$ . Использование стандартных схем подавления шумов амплитудно-модулированных оптических сигналов открывает перспективы получения еще более высокого разрешения.

Работа поддержана грантами РФФИ и ДВО РАН: 14–02–31558–мол\_а, 14–III–В–02–018, 12–І–П24–02, ДВ № 4.6.

1. Gallagher D., LEOS Newsletter (2008).

2. Chiang K.S., Applied Optics **25**, 3, 348 (1986).

#### Модификация формы РФЭС С1*s* электронов при радиационной деградации ПВДФ

#### Злобина Н.А.\*, Песин Л.А.

#### Челябинский государственный педагогический университет, Челябинск, Россия \*e-mail: tasha558559@mail.ru

Воздействию излучения алюминиевого анода, отфильтрованного алюминиевой фольгой, подвергались полукристаллические пленки поливинилиденфторида (ПВДФ) марки Купаг (тип 720, толщина 50 мкм), которые одновременно возбуждались рентгеновской фотоэлектронной эмиссией (РФЭС). Энергия фотонов Al $K_{\alpha 1,2}$ , доминирующих в излучении, составляет 1486.6 эВ. Спектры регистрировались с помощью спектрометра ЭС ИФМ–4 в интервале энергий связи 270–330 эВ, включающем C1s полосу вместе с соответствующими сателлитными структурами. Этот интервал сканировался до и после регистрации F1s спектров для контроля постоянства мощности рентгеновского источника, мониторинга электростатической зарядки образца и изменения атомной концентрации фтора относительно углерода (F/C), которая определялась из отношения интенсивностей спектральных линий F1s/C1s.

Сателлитная структура C1s спектра исключительно чувствительна к типу взаимного упорядочения углеродных атомов. Анализ формы сателлитов энергетических потерь дает возможность мониторинга достаточно малых и постепенных изменений электронной структуры нашего углеродного материала в широком интервале концентраций остаточного фтора. Мы использовали в качестве параметра формы минимальную интенсивность спектра между C1s(CF<sub>2</sub>) пиком и сателлитом, нормированную на высоту главного пика. По мере уменьшения содержания остаточного фтора на поверхности плёнки этот параметр возрастает с очевидной тенденцией к насыщению при малых величинах F/C (рис. 1). Такое поведение свидетельствует об уменьшении эффективной ширины запрещённой зоны, что приводит к возможности меньших энергетических потерь эмитируемого фотоэлектрона при взаимодействии с валентной системой.



Рис. 1. Зависимость измеряемого параметра формы C1*s* спектра от содержания остаточного фтора на поверхности плёнки.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект 2531).

# Электронное и пространственное строение слоистых дисульфидов хрома–меди $CuCr_{1-x}V_xS_2$ по данным рентгеновской, рентгеноэлектронной спектроскопии и квантово–химических расчетов

<u>Коротаев Е.В.</u><sup>1</sup>\*, Перегудова Н.Н.<sup>1</sup>, Канажевский В.В.<sup>2,3</sup>, Пичугин А.Ю.<sup>1</sup>, Сыроквашин М.М.<sup>1</sup>, Андреева А.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия <sup>2</sup>Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия <sup>3</sup>Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия \*e-mail: korotaev@niic.nsc.ru

Слоистые дисульфиды хрома-меди CuCr<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>S<sub>2</sub> ( $x = 0 \div 0.4$ ) благодаря своим физическим свойствам рассматриваются в настоящее время в качестве перспективных многофункциональных материалов для нужд современной электроники. Сочетание высоких коэффициентов удельной термоэдс и низкой теплопроводности данных материалов позволяет рассматривать CuCr<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>S<sub>2</sub> ( $x = 0 \div 0.4$ ) в качестве перспективных термоэлектрических материалов [1]. Суперионные свойства данных соединений могут быть использованы для создания твердотельных источников тока, ионселективных электродов [2]. Сочетание диэлектрических и магнитных свойств позволяет рассматривать CuCr<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>S<sub>2</sub> в качестве материалов спинтроники [3].

В работах [1,4] показано, что атомы меди в CuCrS<sub>2</sub> способны занимать два типа кристаллографических позиций: тетраэдрические и октаэдрические. Характер распределения атомов меди по соответствующим позициям существенно зависит от параметров технологии синтеза.

Вместе с тем в литературе отсутствуют данные о влиянии соответствующего распределения атомов меди в межслоевом пространстве на электронное строение данных соединений.

В данной работе осуществлено комплексное исследование электронной структуры слоистых дисульфидов хрома–меди, полученных с помощью методов высокотемпературной химии. Анализ характера распределения электронной плотности в валентной зоне и зоне проводимости был осуществлен на основании изображения рентгеновских спектров различных серий (Cu( $L\alpha$ ), Cr( $K\beta_{2.5}$ ), V( $L\alpha$ ), S( $K\beta_{1,x}$ ) спектры, K — спектры поглощения) в единой энергетической шкале. Полученные результаты сопоставлены с распределениями парциальных атомных плотностей, рассчитанных с помощью квантово–химического пакета программ ADF. Промоделирована электронная структура рассматриваемых соединений в случае расположения атомов меди в тетраэдрических и октаэдрических позициях, а также электронная структура при катионном замещении атомов хрома атомами ванадия.

Было исследовано влияние различного характера расположения атомов меди и катионного замещения атомов хрома атомами ванадия на структуры главных *К*–краев поглощения меди, хрома, ванадия и серы. На основании проведенных расчетов был сделан вывод о характере распределения атомов меди, хрома, ванадия и серы в исследованных образцах.

- 1. Tewari G.C. et al., Journal of Electronic Materials 39, 1133 (2010).
- 2. Альмухаметов Р.Ф. и др., Физика твердого тела 42, 1465 (2000).
- 3. Karmakar A. et al., Applied physics letters 104, 052906 (2014).
- 4. Васильева И.Г. и др., Журнал структурной химии 50, 302 (2009).

#### Исследование полос, обусловленных рекомбинацией двумерного электронного газа в спектрах фотолюминесценции AlGaN/GaN гетероструктур при высоком уровне возбуждения

#### Осинных И.В.\*, Малин Т.В., Журавлев К.С.

#### Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия \*e-mail: osinus-sb@ya.ru

Гетероструктуры AlGaN/GaN представляют больший интерес для изготовления мощных СВЧ транзисторов с высокой подвижностью электронов. Наличие спонтанной поляризации и пьезополяризации на гетерогранице приводит к возникновению потенциальной ямы для электронов на границе AlGaN/GaN, в которой формируется двумерный электронный газ (ДЭГ) с поверхностной концентрацией электронов и подвижностью, превышающей  $10^{13}$  см $^{-2}$  и 1500 см $^2 \cdot B^{-1} \cdot c^{-1}$  при комнатной температуре. Одним из способов характеризации гетероструктур является фотолюминесцентная (ФЛ) спектроскопия — неразрушающий экспресс-метод, позволяющий определить их энергетическую структуру и состав. Наблюдение связанных с ДЭГ полос в спектрах ФЛ затруднено из-за пространственного разделения ДЭГ и дырок в объеме GaN. При этом обычно в качестве источника возбуждения используют непрерывный лазер с мощностью не выше 200 мВт, поскольку высокие мощности приводят к нагреву образцов. Однако использование импульсных лазеров в качестве источника возбуждения ФЛ позволяет добиться высокого темпа генерации носителей заряда при небольшой средней мощности. Ранее нами были обнаружены ФЛ полосы, связанные с ДЭГ, при сильном импульсном возбуждении, имеющие высокую интенсивность в присутствии акцепторов неизвестной природы [1]. В данной работе представлены результаты по исследованию поведения ДЭГ полос в спектрах ФЛ в зависимости от мощности импульсного возбуждения и объяснения высокой интенсивности этих полос.

В работе исследованы GaN/AlGaN гетероструктуры на сапфировой подложке с ДЭГ с поверхностной концентрацией электронов  $n = 10^{13}$  см<sup>-2</sup> и подвижностью  $\mu = 1100 \div 1700$  см<sup>2</sup>·B<sup>-1</sup>·c<sup>-1</sup> при комнатной температуре. Первый образец был выращен методом молекулярно–лучевой эпитаксии (МЛЭ) из аммиака, второй — методом газофазной эпитаксии из металлорганических соединений (МОСГФЭ). ФЛ возбуждалась непрерывным He–Cd лазером (энергия фотонов 3.81 эВ, мощность лазера 13 мВт) и импульсным азотным лазером (энергия фотонов 3.67 эВ, средняя мощность лазера 40 мВт, частота повторений импульсов 1 кГц, длительность импульса 7 нс). Спектры ФЛ измерялись в диапазоне температур 5–300 К.

В спектрах МОСГФЭ образца наблюдалась интенсивная полоса квази–донорно–акцепторной рекомбинации (Q–DAP) с пиковой энергией  $\hbar\omega_{max} = 3.18$  эВ, что на 110 мэВ ниже, чем для хорошо известной донорно–акцепторной рекомбинации (DAP) ( $\hbar\omega_{max} = 3.29$  эВ). В спектрах время– разрешенной ФЛ эта полоса сдвигается на относительно большую величину порядка 160 мэВ, что означает сильное искривление краев валентной зоны и зоны проводимости. Предполагается, что этот эффект вызван неравномерными напряжениями слоев GaN, которые вызваны разностью параметров решетки слоя и подложки, в основном дислокациями несоответствия. Установлено, что дырки аккумулируются вблизи областей искривлений валентной зоны на гетерогранице, что повышает вероятность их рекомбинации с ДЭГ по сравнению со случаем, когда дырки находятся в объеме GaN, и дает высокую интенсивность связанных с ними ФЛ полос.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 13–02–00985 и 14–02–91371).

1. Osinnykh I.V., Zhuravlev K.S., Malin T.V., Aleksandrov I.A., XII International conference and seminar EDM'2011, Erlagol (2011).

## Алгоритм исправления рентгеновских фотоэлектронных спектров на аппаратное уширение

<u>Саламатов Ю.А.</u>\*, Шакирова Г.Д., Грибов И.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: salamatov@imp.uran.ru

Фотоэлектронные спектры, полученные экспериментально, испытывают влияние аппаратурных искажающих факторов. Эти факторы уширяют линии и изменяют их форму. В настоящей работе предложен подход к исправлению спектров, ко-

торый основан на решении интегрального уравнения свёртки методом касательных (методом Ньютона) с применением регуляризации.

Предложенный метод вначале был апробирован на тестовых модельных расчётах. Модельный спектр представлял собой две узкие линии лоренцевой формы. Положения линий на шкале энергии связи составляли 284 и 286 эВ. Ширина линий — 0.3 эВ. Спектр был искажён с использованием аппаратных функций и параметров для рентгеновского фотоэлектронного спектрометра ЭС–ИФМ–4, расположенного в Институте физики металлов.

Затем была применена предложенная процедура коррекции. Размытый максимум разделился на два чётких пика (рис. 1а). Их центры тяжести и интегральные интенсивности совпали с модельными величинами, ширина оказалась примерно в 3 раза больше заданной (0.94 эВ). Эта тенденция подтвердилась на нескольких модельных расчётах и может считаться систематической погрешностью метода для данных параметров. Лучшего соответствия можно добиться, уменьшив шаг энергетической сетки, но тогда увеличится время расчётов.

В качестве образца для экспериментальной проверки метода использовалась пластинка из серебра. На спектрометре ЭС–ИФМ–4

с использованием характеристического излучения алюминиевого анода были получены фотоэлектронные спектры и обработаны предложенным методом. Спектральные линии удалось разрешить (рис. 1b), их ширина составила примерно 1.29 эВ. Ширина линий по справочнику [1] составляет 0.44 эВ, что примерно в 3 раза меньше полученной величины и совпадает с полученным выше значением систематической погрешности.

Итак, в настоящей работе показано, что предлагаемый метод исправления рентгеновских фотоэлектронных спектров даёт возможность уменьшать влияние таких факторов, как форма возбуждающей линии и аппаратурное уширение. При этом не требуется задание конкретного начального приближения. Метод может быть полезен во всех областях, где используется метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Также возможна адаптация данного подхода к исправлению и обработке экспериментальных данных и в других методах исследования свойств твёрдых тел.

Данная работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» РК–01201463330 при поддержке Президиума РАН (грант № 12–П–2–1032), РФФИ (грант № 14–22–01063–офи\_м) и научной школы НШ–1540.2014.2.

1. Блохин М.А., Швейцер И.Г., Рентгеноспектральный справочник, М.: «Наука» (1982).



Рис. 1. Результаты апробации метода: а) модельные расчёты; b) эксперимент.

#### Определение спинового момента 3*d*–элементов с использованием Кα рентгеновских эмиссионных спектров

Свяжин А.Д.\*, Галахов В.Р., Гижевский Б.А., Курмаев Э.З., Шамин С.Н.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: asvyazhin@yandex.ru



Рис. 1. Рентгеновские эмиссионные спектры железа в избранных соединениях. Обозначения, приведенные на рис. 1(а), применимы к обоим рисункам.



Рис. 2. Сравнение результатов, полученных по методу IAD и из FWHM *K*α<sub>1</sub>. Штриховая линия — визуальная направляющая.

Рентгеновская эмиссионная спектроскопия остовных уровней как методика определения полного спина 3d-оболочки ( $\mathbf{S}_{3d}$ ) обладает рядом существенных преимуществ по сравнению с другими методами [1]. Как форма КВ-мультиплета (рис. 1(а)), так и ширина на половине высоты (FWHM) *К* $\alpha_1$ -линии (рис. 1(б)) связаны с  $\mathbf{S}_{3d}$  посредством обменного взаимодействия 3d электронов с 3p-(2р-) электронами соответственно [2]. Для извлечения численного значения **S**<sub>3d</sub> из *К*β–спектров применяется метод, основанный на расчете абсолютных интегральных разностей (IAD) кривых [3] (см. рис. 1(а)). Зависимость же FWHM  $K\alpha_1$ -полос от  $S_{3d}$  в подобных целях не применяется вовсе. Вместе с тем почти на порядок большая интенсивность Кα-спектра делает его более перспективным при исследовании образцов с малым содержанием исследуемого элемента при небольших изменениях **S**<sub>3d</sub> в ряду соединений, либо при работе с источниками низкой интенсивности возбуждающего пучка. Однако до сих пор эквивалентность результатов, получаемых по двум спектрам, экспериментально подтверждена не была.

Из результатов нашего исследования следует, что в пределах экспериментальной погрешности результаты, получаемые после обработки спектров, одинаковы (рис. 2). При этом относительный диапазон изменения FWHM  $K\alpha_1$  в 1.5 больше, чем у IAD; на саму же величину IAD значительно влияют способ вычитания фона и точность определения центра тяжести мультиплета. В результате экспериментальная погрешность при работе с FWHM  $K\alpha$  составила < 4%, для IAD — > 8%. Время измерения спектров различается в 7–9 раз. Поэтому при полной эквивалентности конечных результатов получение величины  $S_{3d}$  из  $K\alpha_1$ –спектра обладает рядом очевидных преимуществ.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта УрО РАН № 12-М-23-2032.

- 1. Gretarsson H. et al., Phys. Rev. B 84, 100509(R) (2011).
- 2. Tsutsumi K. and Nakamori H., JPSJ 25, 1418 (1968).
- 3. Vanko G. et al., J. Phys. Chem. B 110(24), 11651 (2006).

#### Энергетическая структура иона неодима в моноклинном оксиде иттрия

Торопова П.В.<sup>1,2</sup>, Спирина А.В.<sup>1</sup>

#### <sup>1</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: plasma@iep.uran.ru

В настоящее время получение лазерных керамик является одним из более перспективных направлений в развитии твердотельных лазеров [1]. Методом лазерного испарения получаются наночастицы, удовлетворяющие таким требованиям, как малые размеры частиц, узкое распределение по размерам, их слабая агломерация и высокая чистота [2]. Однако наночастицы оксида иттрия получаются в метастабильной моноклинной γ-фазе[3]. При отжиге на воздухе она переходит в кубическую α-фазу с уменьшением плотности вещества. Поэтому в керамической заготовке возникают механические трещины. Чтобы этого избежать, необходим контроль наличия моноклинной фазы. Обычно для данной цели используется рентгенофазовый анализ, но более чувствительными являются оптические методы, в частности метод, основанный на импульсной катодолюминесценции (ИКЛ) [4]. Для того чтобы определить принадлежность полос в спектре ИКЛ к кубической и моноклинной фазе, необходимо знать энергетическую структуру иона неодима в полях решеток этих фаз. Она известна для кубической решетки Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [5, 6], а для моноклинной — нет.

В данной работе приводится восстановленная по спектрам пропускания энергетическая структура иона  $Nd^{3+}$  в оксиде иттрия моноклинной фазы, ранее не приведенная в литературе (табл. 1). В качестве образца использовался компакт нанопорошка  $Nd^{3+}$  :  $Y_2O_3$  в виде диска диаметром 15 мм и толщиной 300 мкм.

		<u> </u>	10	<b>V 1</b>			-	
Мультиплет	${}^{4}I_{9/2}$	${}^{4}F_{3/2}$	${}^{4}F_{5/2}$	${}^{2}\mathrm{H}_{9/2}$	${}^{4}F_{7/2}$	${}^{4}S_{3/2}$	${}^{4}G_{5/2}$	${}^{2}G_{7/2}$
	0	11191	12188	12346	13158	13324	16628	16801
Положение	24	11299	12276	12463	13271	-	17062	16852
штарковских	238		12398	12516	13365		17215	17010
уровней, см $^{-1}$	361			12681	13426			17100
	449*			_				

Таблица 1. Энергетическая структура Nd<sup>3+</sup> в моноклинном Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

\*Компонент определен по спектру импульсной катодолюминесценции.

По построенной диаграмме уровней иона Nd<sup>3+</sup> в моноклинной решетке оксида иттрия и по известной энергетической структуре Nd<sup>3+</sup> в кубической решетке [5, 6] идентифицированы полосы испускания в спектрах импульсной катодолюминесценции (ИКЛ) образцов порошка моноклинной и кубической фазы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ №№ 13-08-00529 и 14-08-00181.

1. Lu J., Lu J., Murai T., Takaichi K. et al., Jpn. J. Appl. Phys. 40, L1277 (2001).

2. Osipov V.V., Platonov V.V. et al., Phys. Status Solidi C 10(6), 926 (2013).

3. Осипов В.В., Соломонов В.И., Шитов В.В. и др., Огнеупоры и техническая керамика 1-2, 56 (2010).

4. Solomonov V.I., Michailov S.G., Lipchak A.I. et al., Laser Physics 16(1), 126 (2006).

5. Chang N.C., J. Chem. Phys. 44, 4044 (1966).

6. Каминский А.А., Лазерные кристаллы, Наука (1975).

#### Люминесцентные свойства нановискеров нитрида алюминия

#### Чайкин Д.В.\*, Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А., Афонин Ю.Д.

#### Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: d.v.chaikin@urfu.ru

Нитевидные нанокристаллы или нановискеры нитрида алюминия имеют запрещенную зону более 6 эВ и являются перспективным материалом для создания энергоэффективных источников света ультрафиолетового и видимого диапазонов [1]. Образующиеся в процессе синтеза собственные и примесные дефекты, а также их комплексы оказывают значительное влияние на оптические свойства указанных структур AlN. В этой связи цель работы состояла в исследовании спектральных характеристик люминесценции нановискеров AlN, выращенных методом осаждения из газовой фазы.

В работе изучались образцы, полученные на оригинальной установке путем одновременной обработки жидкого алюминия газообразным хлоридом алюминия и азотом при конденсации на подложке из поликристаллического AlN [2]. Морфологические особенности синтезированных структур изучались на растровом электронном микроскопе (РЭМ) Sigma VP Carl Zeiss. Химический анализ выполнялся с использованием энергодисперсионного детектора (EDS) X-max Oxford Instruments. Исследования процессов фото- (ФЛ) и электролюминесценции (ЭЛ) проводились на спектрометре LS 55 Perkin Elmer в режиме фосфоресценции с использованием разработанной ЭЛ ячейки. Исследование импульсной катодолюминесценции (ИКЛ) выполнялось на установке «КЛАВИ–Р».

В рамках анализа РЭМ–изображений определено, что полученные нитевидные образцы имеют средний диаметр 68  $\pm$  22 нм и аспект более 100. Установлено, что вискеры выращены в условиях дефицита азота с соотношением Al : N  $\approx$  1 : 0.8, основные примеси — кислород (18.5 ат. %) и углерод (5.5 ат. %). Показано, что все измеренные спектры люминесценции удовлетворительно описываются суперпозицией нескольких компонент гауссовой формы, энергии максимумов ( $E_{\rm max}$ ) и полуширины ( $\omega$ ) которых приведены в табл. 1.

	Компоненты									
Метод	G1		G2		G	3	G4			
	$E_{ m max}$ , эВ	ω, эΒ	$E_{ m max}$ , эВ	ω, эΒ	$E_{ m max}$ , эВ	ω, эΒ	$E_{ m max}$ , эВ	ω, эΒ		
ФЛ	3.16	0.73	2.90	0.27	2.55	0.69	_	—		
ЭЛ	-	_	2.75	0.30	2.52	0.38	-	_		
ИКЛ		_	2.93	0.79	2.46	1.02	1.77	0.01		

Таблица 1. Параметры разложения экспериментальных спектров люминесценции.

На основе сопоставления результатов наших и независимых исследований регистрируемые спектральные полосы G1, G2 и G3 были отнесены к электрон–оптическим переходам между донорными уровнями  $O_N$ –,  $V_N$ –центров и акцепторными состояниями  $V_{Al}$ ,  $C_N$ –центров. В то же время узкая полоса свечения G4, регистрируемая только в ИКЛ, была приписана неконтролируемой примеси хрома. Также обсуждаются механизмы исследуемой люминесценции, протекающие с участием кислородсвязанных ( $O_N$ – $V_{Al}$ )–комплексов.

Работа выполнена при финансовой поддержке УрФУ в рамках реализации Программы развития УрФУ для победителей конкурса «Молодые ученые УрФУ».

- 1. Vokhmintsev A.S., Weinstein I.A., Chaikin D.V. et al., Functional Materials 21(1), 21 (2014).
- 2. Афонин Ю.Д., Бекетов А.Р., Жукова Л.М. и др., Патент РФ № 2106298 (1998).

#### Рентгеноспектральное исследование диселенида титана, интеркалированного железом и марганцем

Шкварин А.С.<sup>1</sup>\*, Меренцов А.И.<sup>1,2</sup>, Можчиль Р.Н.<sup>3</sup>, Воробьёва Н.С.<sup>3</sup>, Титов А.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>3</sup>Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия \*e-mail: shkvarin@ifmlrs.uran.ru

Слоистые дихалькогениды титана являются перспективными функциональными материалами для применения их в спиновой электронике. Кристаллическая структура таких соединений состоит из пакетов Ti–Se–Ti с сильным межатомным взаимодействием, которые связаны друг с другом слабым Ван–дер–Ваальсовым взаимодействием. Это позволяет внедрять в межслоевое пространство атомы и даже молекулы. Отдельный интерес представляет собой возможность проводить послойную интеркалацию атомов, то есть в одном монослое находятся преимущественно атомы одного металла, в следующем — другого. Однако в данном случае неизбежно возникает проблема аттестации образцов.

В данной работе проведено исследование Fe<sub>0.25</sub>Mn<sub>0.1</sub>TiSe<sub>2</sub>. В качестве метода исследования был использован метод фотоэлектронной спектроскопии, для которой характерна небольшая глубина проникновения. Для послойного исследования образец подвергался травлению аргоном в течение 5 минут. Эксперимент выполнен в Институте физики твердого тела в лаборатории спектроскопии поверхности полупроводников на рентгеновском спектрометре KRATOS с использованием монохроматизированного излучения алюминиевой трубки (энергия возбуждения ~ 1486 эВ). Для получения чистой поверхности образцы были сколоты в подготовительной камере при давлении 1  $\times 10^{-7}$  Па.

На рисунке приведены экспериментальные спектры остовных уровней до (нижний спектр) и после (верхний спектр) травления аргоном. На нижнем графике хорошо заметно Mn 2p полосы, спектр Fe 2p, напротив, практически не виден, несмотря на большую концентрацию. На верхнем графике, напротив, отчетливо виден 2p спектр железа и практически не виден спектр марганца. Возможны два варианта объяснения такого поведения:

1. Ранее было установлено, что атомы марганца с атомами матрицы TiSe<sub>2</sub> имеют преимущественно ионную связь, а атомы железа образуют ковалентные центры. Это объясняет, почему первоначально скол идет по Ван–дер–Ваальсовой щели, содержащей преимущественно атомы марганца. После травления мы видим более глубокий слой железа.

2. При синтезе может образовываться иодид марганца, который дает дополнительный вклад в спектр марганца. После травления он пропадает.



Рис. 1. Экспериментальные спектры остовных уровней до (нижний спектр) и после (верхний спектр) травления аргоном.

Для определения точной причины различия спектров планируются дальнейшие исследования.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 13–03–96032 и № 14–03–00274) и Президиума УрО РАН (проект № 12–М–23–2010).

#### Отражение и прохождение электромагнитной волны в тонких двухслойных металл–диэлектрических пленках при наклонном падении

#### Щелкунов Н.М.

## Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар, Россия e-mail: shhelkunov@gmail.com

Электродинамика тонких слоев и пленок является в настоящее время одной из наиболее интересных тем научных исследований. Это связано с тем, что различные металлические, диэлектрические и полупроводниковые слои находят применение во многих областях науки и техники. Изучение свойств наноразмерных пленок играет большую роль для создания и усовершенствования различных СВЧ устройств, таких как перестраиваемые фильтры, а также интегральной микросхемотехники. Большой интерес представляет использование тонких пленок для фотонных кристаллов [1].

В данной работе на основе граничных условий импедансного типа [2] прямым методом [3] были получены коэффициенты отражения и прохождения электромагнитной волны при угловом падении. Ниже приведены наиболее симметричные формулы коэффициента прохождения параллельной составляющей и коэффициента отражения перпендикулярной составляющей вектора напряженности электрического поля для частного случая диэлектрических пленок.

$$\begin{cases} T_{\text{par}} = \frac{8D}{X^2 + Y^2}, \\ R_{\text{per}} = \frac{M^2 + N^2}{T^2 + K^2}. \end{cases}$$
(1)

$$X, M, T_{(Y,N,K)} = \cos_{(\sin)}(d_1(B_{jn} + B_{km} + d_2(C_{kn} + C_{jm}))\left(\sum A_i\right) + + 2\cos_{(\sin)}(d_1(B_{jn} + B_{km} + d_2(C_{kn}C_{jm}))\left(\sum A_i\right) + + \cos_{(\sin)}(d_1(B_{jn}B_{km} + d_2(C_{kn}C_{jm}))\left(\sum A_i\right),$$

где  $A_i$ ,  $B_{jn}$ ,  $C_{kn}$ , D — комбинации тригонометрических функций углов падения и импедансов сред,  $d_1$ ,  $d_2$  — толщины напыляемых пленок.

Таким образом, в данной работе:

1. Изучено поведение плоской электромагнитной волны при наклонном падении на двухслойную структуру.

2. Найдены коэффициенты прохождения и отражения для двухслойной структуры: подложкапленка.

3. Найдены зависимости толщины слоя от коэффициентов прохождения и отражения компонент поляризации для диэлектриков и металлов.

- 1. Яблонович Р.А., Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).
- 2. Каплан А.Е., РЭ 10, 1781 (1964).
- 3. Борн М., Вольф Э., Основы оптики, Наука (1973).
- 4. Бреховских Л.М., Волны в слоистых средах, Наука (1973).

#### Термо– и оптически стимулированная люминесценция SrF<sub>2</sub> с редкоземельными активаторами

Ягодин В.В.\*, Ищенко А.В., Шульгин Б.В.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: viktor.v.yagodin@gmail.com

В последние 30 лет активно развиваются методы термо– и оптически–стимулированной люминесценции (ТЛ и ОСЛ) для применения в индивидуальной, медицинской и аварийной дозиметрии [1]. Основной проблемой данного научного направления является недостаток знаний о свойствах материалов, проявляющих ТЛ и ОСЛ [2]. Данная работа направлена на расширение сведений о параметрах стимулированной люминесценции в кристаллах фторида стронция.

В ходе исследования измерены спектры рентгено– и катодолюминесценции соединений SrF<sub>2</sub> : Dy (1%), SrF<sub>2</sub> : Tb (0.1%), Dy (0.1%), сняты кривые высвечивания термостимулированной и оптически стимулированной люминесценции. Измерена дозовая зависимость световыхода стимулированной люминесценции при облучении рентгеновским излучением.

В спектрах эмиссии идентифицированы характерные спектральные линии, соответствующие переходам в ионах редкоземельных металлов, и пик свечения свободных экситонов в области 300–350 нм, характерный для чистого фторида стронция (рис. 1а). Впервые обнаружена стимулированная люминесценция у соединений SrF<sub>2</sub> : Dy (1%), SrF<sub>2</sub> : Tb (0.1%), Dy (0.1%). По результатам математического моделирования кривые аппроксимированы суммой двух экспоненциальных выражений, в обоих случаях обнаружены быстрая и медленная компонента (рис 16, 1в).

По результатам работы рекомендовано продолжение исследований механизмов стимулированной люминесценции фторидов стронция с редкоземельными активаторами. Также для определения степени пригодности таких соединений для применения в твердотельной дозиметрии рекомендуется исследовать ряд свойств — прозрачность к собственному излучению, гигроскопичность, фединг, радиационная стойкость и т.д.



Рис. 1. а — спектры рентгенолюминесценции образцов; б, в — экспериментальные и смоделированные кривые затухания ОСЛ образцов.

- 1. Yukihara E.G., McKeever S.W.S., Optically stimulated luminescence. Fundamentals and applications, a John Wiley and Sons Ltd. (2011).
- 2. Ягодин В.В., Абашев Р.М., Ищенко А.В., Проблемы спектроскопии и спектрометрии 33, 125 (2014).

# Теория конденсированного состояния

#### Влияние упругой анизотропии на теплопроводность монокристаллических нанопленок и нанопроводов при низких температурах

Бахарев С.М.\*, Кулеев И.Г., Кулеев И.И.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: sergeybm@mail.ru

Исследовано влияние анизотропии упругой энергии на фононный транспорт в монокристаллических нанопленках и нанопроводах при низких температурах. Упругая анизотропия кубических кристаллов определяется безразмерным параметром  $k-1 = (c_{12}+2c_{44}-c_{11})/(c_{11}-c_{44})$ , где  $c_{ij}$  — упругие модули второго порядка [1]. В зависимости от знака параметра k-1 все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной k-1 > 0 (LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) и отрицательной k-1 < 0 (CaF<sub>2</sub>, NaCl, YIG) анизотропией упругих модулей второго порядка. Для изотропных сред k-1 = 0. Нами показано, что направления фокусировки фононов для кристаллов одного типа совпадают, тогда как для кристаллов различного типа они существенно отличаются [2]. Поэтому для наноструктур из кристаллов первого и второго типа анизотропия теплопроводности качественно изменяется. Так, например, для нанопроводов из кристаллов первого типа длина пробега для медленных поперечных фононов в направлении [100] принимает максимальные значения, а для кристаллов второго типа — минимальные. В отличие от кубических кристаллов, в модели изотропной среды длины пробега фононов разных поляризаций совпадают и равны средней длине свободного пробега. Они определяются полностью геометрическими параметрами и являются удобной системой сравнения для упруго анизотропных наноструктур.

Анализ анизотропии теплопроводности показал, что в нанопроводах с квадратным сечением она зависит главным образом от направления теплового потока, а в достаточно широких нанопленках она в значительной степени определяется ориентацией плоскости пленки [2]. Определены ориентации плоскостей монокристаллических пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальные или минимальные значения теплопроводности в плоскости пленок [2]. В кристаллах первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si и YAG) максимальные значения теплопроводности достигаются для пленок с ориентацией плоскости {100}, а минимальные значения — для пленок с ориентацией плоскости {111}. Тогда как в пленках на основе кристаллов второго типа (CaF<sub>2</sub>, NaCl и YIG) с ориентацией плоскости - для ориентации плоскости {110} и направления, а максимальные значения теплопроводности — для ориентации плоскости {110} и направления теплового потока [110].

Анализ, проведенный в работе [3], показал, что длины Казимира (длины свободного пробега фононов в образцах бесконечной длины) для изотропных сред логарифмически расходятся при стремлении ширины пленки к бесконечности. Нами проанализированы зависимости теплопроводности и длин свободного пробега фононов от геометрических параметров наноструктур. Показано, что учет конечной длины пленки приводит к устранению расходимости как в изотропных средах, так и в упруго анизотропных материалах. Интервал интенсивного роста длин пробега фононов с увеличением ширины пленки ограничен ее длиной, а при значениях ширины пленки, в 10 раз превосходящих её длину, их зависимости выходят на насыщение.

Работа выполнена при поддержке программы ОФН РАН грант № 12–Т–2–1018, а также гранта ведущей научной школы НШ–14.120.14.1540.

- 1. Кулеев И.Г., Кулеев И.И., ФТТ **49**, 422 (2007).
- 2. Кулеев И.И., Кулеев И.Г., Бахарев С.М., ЖЭТФ 146, 525 (2014).
- 3. Zaitlin M.P., Scherr L.M., Anderson A.C., Phys. Rev. B 12, 4487 (1975).

## Влияние модифицирующих стёкол на свойства твёрдых растворов системы NaNbO<sub>3</sub>–LiNbO<sub>3</sub>

#### Вербенко И.А.

#### Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия e-mail: iaverbenko@sfedu.ru

Использование метода модифицирования стеклом позволяет значительно снизить температуру ( $T_{\rm CII}$ ) и расширить температурный интервал спекания ( $\Delta T_{\rm CII}$ ), повысить механическую прочность и получить тонкозернистую однородную беспористую структуру функциональных материалов. Преимуществом стеклокерамической технологии является интенсификация процессов образования керамики в условиях жидкофазного спекания, обеспечивающая, прежде всего, улучшение её керамических свойств. Результаты многих исследований стеклокерамик показали также, что вводимые стеклодобавки не являются инертными по отношению к электрическим параметрам, оказывая, таким образом, влияние на весь комплекс физических свойств исходных систем. При этом во многих случаях отмечалось улучшение диэлектрических и пьезоэлектрических характеристик, что позволяло практически использовать стеклокерамики в технике. Но, несмотря на перечисленные достоинства, невозможность широкого управления параметрами стеклокерамик технологическими приёмами ограничивало их области применений. В связи с этим были предприняты попытки исследования влияния небольших добавок стёкол на спекание и свойства сегнетопьезокерамических материалов, получаемых горячим прессованием (ГП).

Следует заметить, что если результаты совместного действия введения стёкол и ГП в случае классических свинецсодержащих материалов в какой–то мере можно предвидеть в силу того, что каждая операция в отдельности приводит к одинаковым эффектам (снижению  $T_{\rm CII}$ , среднего размера зёрен ( $\bar{D}$ ), увеличению  $\Delta T_{\rm CII}$ , улучшению электрофизических параметров), результат использования ГП при получении ниобатных стеклокерамик не является очевидным, так как, как было отмечено выше, ГП не приводит к снижению температуры спекания и среднего размера зёрен ниобатных материалов, а стеклокерамики в системе (Na,Li)NbO<sub>3</sub> вообще не получали. Восполнению этого пробела и посвящена настоящая работа.

Невозможность предсказания эффектов действия модифицирующих стёкол в ГП–керамиках обусловлена также спецификой фазовых превращений в бинарных оксидных системах, составляющих исходный твёрдый раствор (ТР), которые могут осложнить взаимодействия между стеклом и основой и, как следствие, затруднить развитие рекристаллизации при спекании. Получение ниобатных стеклокерамик ГП повышает также требования к выбору состава, количеству и способу введения стеклодобавок, так как кроме проявляющихся и при обычном обжиге нежелательных эффектов появления неконтролируемых метастабильных соединений (продуктов взаимодействия спекаемого материала с веществом межкристаллитной жидкой фазы), затрудняющих процесс образования пьезокерамики, появляется опасность сильной деформации заготовок, содержащих стекло, под действием давления при ГП.

В качестве объектов исследования выбраны TP «чистой» и модифицированной системы NaNbO<sub>3</sub>– LiNbO<sub>3</sub>: Na<sub>0.875</sub>Li<sub>0.125</sub>NbO<sub>3</sub> (A), Na<sub>0.850</sub>Li<sub>0.122</sub>W<sub>0.028</sub>NbO<sub>3</sub> (B). В работе показано, что физические свойства изученных TP могут быть существенным образом изменены введением стёкол, при этом оптимальные результаты достигаются при получении TP по методике, сочетающей элементы стеклокерамической технологии и ГП.

Работа выполнена при финансовой поддержке МОН РФ (базовая и проектная части гос. задания темы № 213.01–11/2014–21, 213.01–2014/012–ВГ, и 3.1246.2014/К) и ФЦП (ГК № 14.575.21.0007).

#### Анализ активационных процессов в переохлажденных модельных стеклах

#### Галимзянов Б.Н.\*, Мокшин А.В.

#### Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия \*e-mail: bulatgnmail@gmail.com

В данной работе был выполнен расчет термодинамических и кинетических параметров кристаллизации модельных однокомпонентной и бинарной стекольной системы при глубоких переохлаждениях. Моделирование однокомпонентной системы осуществлялось через потенциал Джугутова [1,2], в то время как расчет энергии взаимодействия бинарной смеси был осуществлен через потенциал Леннард–Джонса [3]. Посредством быстрого охлаждения обе системы были зааморфизованы. Непосредственными признаками аморфной фазы служили наличие удвоенного второго пика в радиальной функции распределения частиц и крайне низкие значения самодиффузии.

На начальном этапе вводится безразмерная температура  $\hat{T}$  с одинаковыми значениями температуры стеклования  $T_{\rm g}$  и температуры плавления  $T_{\rm m}$  для любой системы:

$$\hat{T} = \left[\frac{0.5 T_{\rm m}^2 - T_{\rm g}^2}{T_{\rm g}(T_{\rm m} - T_{\rm g})}\right] \left(\frac{T}{T_{\rm m}}\right) + \left[\frac{(T_{\rm g} - 0.5 T_{\rm m}) T_{\rm m}}{T_{\rm g}(T_{\rm m} - T_{\rm g})}\right] \left(\frac{T}{T_{\rm m}}\right)^2.$$
(1)

Посредством кластерного анализа и методом среднего времени первого появления [4] были рассчитаны размер критического зародыша  $n^*$  и время его первого появления  $\tau_1$ , численные значения которых представлены в табл. 1. Показано наличие сферической морфологии у кристаллических зародышей на основе расчетов параметра несферичности  $S_0$  (с учетом статистической обработки). Получены численные значения высоты активационного барьера нуклеации  $\Delta G/(k_BT)$ . Также выполнен расчет температурной зависимости скорости пристегивания частиц  $g^+$  к кластеру. Для удобства величины  $\tau_1$  и  $g^+$  измеряются в единицах  $\tau$  и  $\tau^{-1}$  соответственно.

	<u>1</u> , , , , ,										
	$\hat{T}$	<i>n</i> *	$\tau_1$	$g^+$	$\Delta G/k_BT$		$\hat{T}$	$n^*$	$ au_1$	$g^+$	$\Delta G/k_BT$
Dz	0.046	88	372	8.5	14.39	BLJ	0.0047	42	843	2	13.18
	0.091	92	340	9.7	14.29		0.023	55	820	3.5	12.89
	0.13	96	305	11.1	14.05		0.047	57	800	4.9	12.84
	0.26	105	250	11.7	13.88		0.096	58	795	5.2	12.82
	0.42	108	220	12.8	13.69		0.15	59	785	6.4	12.81

Таблица 1. Численные данные нуклеационных параметров однокомпонентной (Dz) и бинарной (BLJ) стекольной системы.

Таким образом, доказано наличие слабого активационного процесса при глубоких переохлаждениях и наличие нуклеации структурных образований в виде кристаллических кластеров. Обнаружено, что кристаллические зародыши в однокомпонентном стекле формируются быстрее, чем в бинарной системе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-02-00335-а).

- 1. Mokshin A.V., Barrat J.-L., Phys. Rev. E 82, 021505 (2010).
- 2. Dzugutov M., Phys. Rev. A 46, R2984 (1992).
- 3. Toxvaerd S., Pedersen U.R., Schroder T.B., Dyre J.C., J. Chem. Phys. 130, 224501 (2009).
- 4. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N., J. Phys. Chem. B 116, 11959 (2012).

#### Влияние высоких давлений на электронную структуру и транспортные свойства европия

Гапонцев В.В.<sup>1</sup>\*, Морозова Н.В.<sup>1</sup>, Овсянников С.В.<sup>2</sup>, Щенников В.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Университет геофизики, Байройт, Германия \*e-mail: g\_v\_v@mail.ru

Долгое время результаты экспериментальных исследований спектроскопии края рентгеновского поглощения (XANES) L3 европия под давлением [1], результаты исследований 151Eu методом мессбауэровской спектроскопии до 14 ГПа [2], а также данные синхротронного мессбауэровского эксперимента при нормальной температуре [3] интерпретировались исключительно с точки зрения резкого роста валентности европия под давлением. Однако в последних экспериментах XANES магнитного кругового дихроизма рентгеновских лучей и синхротронной мессбауэровской спектроскопии показано, что европий остается почти двухвалентным до 87 ГПа, а изменения спектра европия в диапазоне давлений 10–20 ГПа относятся к существенным изменениям электронной и кристаллической структур, сопутствующим фазовому переходу ОЦК–ГПУ [4].

В последней работе в качестве одной из основных причин изменения свойств европия под давлением указано изменение в электронной заселенности 4f-уровня, но эту роль могут играть и изменения плотностей состояний *s*-, *p*- и *d*-электронов. Таким образом, в настоящее время возникла потребность в уточнении процессов, которые происходят в электронной структуре европия под давлением.

Влияние высоких давлений на электронные свойства европия исследовалось методами *in situ* измерения электросопротивления и ТЭДС, а также путем первопринципных расчетов электронной структуры европия для ряда значений давления в рамках метода PWSCF [5] в приближении локальной электронной плотности (LDA).

На всех графиках зависимостей парциальных плотностей электронных состояний на уровне Ферми от давления, полученных с помощью первопринципных расчетов, есть несколько особенностей, коррелирующих с изменениями кристаллической структуры европия и его транспортных свойств. Количественный анализ полученных данных позволяет сделать вывод, что основной вклад в изменение электронной структуры европия под давлением дают изменения плотностей состояний *s*, *p* и *d*.

Работа была выполнена в соответствии с планом РАН (код «Поток») при поддержке гранта РФФИ № 14–02–31142 и проекта Президиума УрО РАН № 12–П–2–1004.

1. Röhler J., Physica B 144, 27 (1986).

- 2. Taylor R.D., Farrell J.N., J. Appl. Phys. 61, 3669 (1987).
- 3. Wortmanna G., Ponkratza U., Bielemeiera B., Rupprecht K., High Pressure Research 28, 545 (2008).
- 4. Bi W., Souza-Neto N.M., Haske D., Fabbris G., Alp E.E., Zhao J., Hennig R.G., Abd-Elmeguid M.M., Meng Y., McCallum R.W., Dennis K., Schilling J.S., Phys. Rev. B **85**, 205134 (2012).
- 5. http://www.quantum-espresso.org/
- 6. McWhan D.B., Souers P.C., Jura G., Phys. Rev. 143, 385 (1966).
#### Скошенное спиральное магнитное упорядочение в слоистых системах

#### <u>Гильмутдинов В.Ф.</u>\*, Тимиргазин М.А., Аржников А.К. Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия \*e-mail: vitaliodestroyer@gmail.com

Известно, что магнитные свойства купрата лантана  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  тесно связаны с его сверхпроводящими свойствами, возникающими при допировании его стронцием. Это обуславливает интерес к изучению магнитной структуры  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ . Купрат лантана представляет собой квазидвумерное соединение, в котором электронная проводимость обеспечивается в основном медькислородными слоями, лежащими в одной плоскости. Обменное взаимодействие между ближайшими медь-кислородными слоями в соединении  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  пренебрежимо мало и составляет около  $10^{-5}$  от внутрислойного обменного взаимодействия [1], что и позволяет рассматривать  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  как квазидвумерную структуру. По этой причине теоретическое исследование данного соединения проводится с помощью двумерных моделей, что является обоснованным в большинстве случаев. Тем не менее, несмотря на свою малость, межслойное взаимодействие также играет роль в формировании магнитного порядка. В экспериментах [2,3] было обнаружено, что магнитные моменты в соседних медь-кислородных слоях имеют слабое перпендикулярное к плоскости антиферромагнитное упорядочения получается так называемая скошенная структура, в которой угол скашивания по отношению к плоскости медь-кислородного слоя равен 0.17°.

По аналогии с манганитами в литературе принято объяснять причину формирования скошенной структуры в  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  взаимодействием Дзялошинского–Мория [2]. Однако не были рассмотрены другие возможные объяснения такого упорядочения, в частности, за счет анизотропии интеграла переноса электронов по отношению к направлению в медь–кислородной плоскости и перпендикулярно ей. Мы показали, что скошенная магнитная структура может быть объяснена в рамках простого приближения Хартри–Фока для модели Хаббарда, если принять в рассмотрение малый интеграл межслойного электронного переноса. Таким образом, предложен альтернативный вариант механизма формирования магнитного порядка  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ , основанный на зонном подходе и не требующий наличия в системе спин–орбитального взаимодействия.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-02-31603 и грантом УрО РАН № 14-2-НП-273.

- 1. Cheong S-W. и др., Solid St. Comm. 65, 111 (1988).
- 2. Thio Т. и др., Phys. Rev. В 38, 905 (1988).
- 3. Lavrov A.N. и др., Phys. Rev. Lett. 87, 017007 (2001).

#### Кристаллическая структура бромида серебра

#### Гимаев А.В.

#### Кемеровский государственный университет, Кемерово, Россия e-mail: s\_li28@mail.ru

Бромид серебра представляет большой интерес как для экспериментальных, так и для теоретических исследований вследствие его применения в такой важной области, как медицина, а именно используют в качестве катализатора в органическом синтезе, также более важное применение находит в фотографической промышленности при производстве светочувствительных материалов фотографической бумаги, фотографической пленки и кинопленки. Также бромид серебра применяется для создания специальных стёкол, изменяющих свою прозрачность при разной освещённости. В данной работе теоретически исследована кристаллическая структура бромида серебра при нормальных условиях.

Известно, что бромид серебра имеет гранецентрированную кубическую решетку типа NaCl пространственной группой симметрии (225) и постоянную решетки a(AgBr) = 5.77 Å, найденную экспериментально в работе [1].

В рамках теории функционала электронной плотности в приближении гибридного обменнокорреляционного функционала PBE0 программным кодом CRYSTAL09 [2,3] с использованием базиса контрактированных гауссовых орбиталей TZVP [4] проведено моделирование электронной структуры кристалла бромида серебра. В результате оптимизации геометрии были получены равновесные геометрические параметры для данной кристаллической структуры без и с учетом эмпирической дисперсионной поправки Гримме (DFT–D) [5]. Выявлено, что с использованием поправки получается хорошее согласие с экспериментом в работе [1]. Для интегрирования по зоне Бриллюэна использовалась сетка  $8 \times 8 \times 8$ . Вычисленная полная энергия составляет  $E_t = -7772.756$  На, вклад дисперсионной поправки равен  $E_{disp} = -0.02589$  На. Найденный параметр постоянной решетки равен a(AgBr) = 5.75 Å, относительная погрешность равна 0.3%.

Исследование зарядов атомов по Малликену показало, что атомы серебра приобретают примерно одинаковый избыточный положительный заряд, равный 0.969|*e*|, атомы брома имеют соответствующие отрицательный заряды.

Также были получены карты распределения кристаллической и деформационной электронной плотности для бромида серебра. Исследуя карту полной кристаллической плотности, можно видеть на местах атомов серебра и брома сферически–симметричное распределение плотности, а в межатомном пространстве находится минимум электронной плотности. На карте деформационной плотности можно видеть переток заряда от атомов серебра к атомам брома, что говорит о преимущественно ионном типе связи.

1. Wilson D.J., Sokol A.A., French S.A., Catlow C.R.A., Phys. Rev. B 77, 064115 (2008).

- 2. Dovesi R. et al., CRYSTAL09 Users' Manual, University of Torino, Torino, 2010.
- 3. Dovesi R. et al., Zeit. Kristallogr. 220, 571 (2005).
- 4. Peintinger M.F. et al., J. Comput. Chem. 34, 451 (2013).
- 5. Grimme S., J. Comput. Chem. 27, 1787 (2006).

#### Фононный спектр эльпасолитов Cs<sub>2</sub>NaYbF<sub>6</sub> и Cs<sub>2</sub>NaYF<sub>6</sub>: *ab initio* расчет

Закирьянов Д.О.\*, Чернышёв В.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: dm96i@mail.ru

Эльпасолиты  $M_2ALnX$  (A,M — металлы, Ln — редкоземельный ион, X — галоген) привлекают внимание исследователей как перспективные оптические матрицы [1]. В научной печати отсутствует информация об *ab initio* расчетах их фононного спектра. В данной работе впервые выполнен такой расчет для Cs<sub>2</sub>NaYbF<sub>6</sub> и Cs<sub>2</sub>NaYF<sub>6</sub>.

Оптические свойства эльпасолитов определяются редкоземельными (РЗ) ионами, составляющими подрешетку, либо входящими в них в качестве примеси. Оптический спектр f-f переходов РЗ ионов содержит большое количество фононных повторений, для его интерпретации и выделения электронных переходов необходима информация о частотах и типах колебаний решетки. Наиболее адекватно фононный спектр воспроизводится из современных первоприципных расчетов периодических структур [2], что позволяет воспроизвести все моды данного кристалла, в том числе молчащие. В данной работе в рамках подхода МО ЛКАО (молекулярные орбитали — линейные комбинации атомных орбиталей) с использованием полноэлектронных базисных наборов был проведен расчет кристаллической структуры и фононного спектра эльпасолитов Cs<sub>2</sub>NaYbF<sub>6</sub> и Cs<sub>2</sub>NaYF<sub>6</sub>. Расчет был проведен в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием гибридных функционалов B3LYP и PBE0. Была использована программа CRYSTAL, расчеты производились на вычислительном кластере лаборатории компьютерного моделирования. В результате расчетов были определены частоты и типы мод в точке Г, LO–TO расщепление. Такие расчеты проведены впервые, полученные результаты могут быть использованы для интерпретации измеренных инфракрасных спектров и спектров комбинационного рассеяния эльпасолитов Cs<sub>2</sub>NaYF<sub>6</sub>.

1. Zhou X., Reid M.F., Faucher M.D., Tanner A.P., J. Phys. Chem. B 110, 14939 (2006).

2. Dovesi R., Saunders V.R., Roetti C., Orlando R., CRYSTAL09 User's Manual (2009).

# Магнитные фазовые диаграммы и переход металл–диэлектрик в t-t' модели Хаббарда для кубических решеток при учете электронных корреляций и спиральных магнитных состояний

<u>Игошев П.А.</u><sup>1\*</sup>, Тимиргазин М.А.<sup>2</sup>, Гильмутдинов В.Ф.<sup>2</sup>, Аржников А.К.<sup>2</sup>, Ирхин В.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия \*e-mail: timirgazin@gmail.com

С помощью методов вспомогательных бозонов [1] и Хартри–Фока (среднего поля) изучено формирование несоизмеримого спирального магнитного упорядочения в основном состоянии модели Хаббарда для кубических решеток в широком диапазоне параметров электронной концентрации (n) и кулоновского взаимодействия (U). Построены магнитные фазовые диаграммы для простой кубической, ОЦК и ГЦК решеток для различных значений отношения интегралов переноса между вторыми и ближайшими соседями t'/t с учетом фазового расслоения.



Рис. 1. Фазовая диаграмма модели Хаббарда для простой кубической решетки при t' = 0 в приближениях а) вспомогательных бозонов и b) Хартри–Фока. Спиральные фазы отмечены видом волнового вектора магнитного упорядочения. Штриховкой обозначены области фазового расслоения.

Показано, что учет корреляционных эффектов с помощью приближения вспомогательных бозонов существенно меняет среднеполевые магнитные фазовые диаграммы. Характер изменений, в целом, оказывается схож с полученными ранее результатами для двумерной решетки [2]: значительно подавляются области магнитных фаз, снижается их разнообразие, усиливается асимметрия фазовых диаграмм по отношению к линии половинного заполнения (n = 1) при увеличении параметра t'/t. Вблизи половинного заполнения влияние электронных корреляций незначительно — последовательность чередования фаз при увеличении *U* не меняется.

Для всех изученных типов решеток исследован переход металл–диэлектрик при половинном заполнении зоны. Рассмотрен широкий диапазон параметров t'/t и обнаружено, что во всех случаях магнитный переход металл–диэлектрик, вызванный возникновением энергетической щели в элек-

тронном спектре магнитоупорядоченного состояния, происходит при значительно более низких значениях *U*, чем парамагнитный моттовский переход металл–диэлектрик.

Работа выполнена при частичной поддержке проектов РФФИ № 14–02–31603 и УрО РАН № 14–2– НП–273.

1. Kotliar G. and Ruckenstein A.E., Phys. Rev. Lett. 57, 1362 (1986).

2. Игошев П.А., Тимиргазин М.А., Аржников А.К., Ирхин В.Ю., Письма в ЖЭТФ 98, 172 (2013).

## Определение ориентационной связи между структурными составляющими эвтектоида сплава U — 1.5%Мо

Кабанова И.Г.<sup>1</sup>, <u>Клюкина М.Ф.</u><sup>1\*</sup>, Сагарадзе В.В.<sup>1</sup>, Печеркина Н.Л.<sup>1</sup>, Зуев Ю.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>РФЯЦ-ВНИИТФ им. академика Е.И. Забабахина, Снежинск, Россия \*e-mail: klyukina@imp.uran.ru

С помощью электронной микроскопии исследованы образцы сплава U–1.5% Мо после закалки в воде от 1000°С со образованием эвтектоида, состоящего из пластин обеднённой по Мо  $\alpha$ –фазы ( $\alpha$ –U) и упорядоченной  $\gamma'$ –фазы U<sub>2</sub>Мо в соответствии с фазовой диаграммой [1]. Формирование эвтектоида в приграничных областях зёрен связано с недостаточно быстрым охлаждением образцов в вакуумированной трубке. Внутри зёрен  $\gamma$ –фазы образовывался  $\alpha'$ –мартенсит. После отпуска при 540°С сохранялись эвтектоидные колонии и формировалась структура отпущенного мартенсита ( $\alpha$ –U). Представляло интерес определить ориентационные соотношения (ОС) между составляющими эвтектоида в сплаве U–Mo (аналогично, например, ОС Багаряцкого в перлите сплава Fe–C).

Расшифровка микродифракций и последующий кристаллографический анализ эвтектоида с использованием стереографических проекций показали следующее:

1) между фазами  $\alpha$ –U с орторомбической решёткой и  $\gamma'$ –U<sub>2</sub>Mo с тетрагональной решёткой в эвтектоиде выполняются ориентационные соотношения (ОСэ):

$$(100)_{\alpha} \parallel (113)_{\gamma'}, (010)_{\alpha} \parallel (11\bar{6})_{\gamma'}, (001)_{\alpha} \parallel (\bar{1}10)_{\gamma};$$

2) плоскости пластин в колониях эвтектоида параллельны плоскостям  $(001)_{\gamma'} \parallel (1\bar{3}0)_{\alpha}$ , из которых  $(001)_{\gamma'}$  параллельна плоскостям атомного упорядочения.

Полученные ориентационные соотношения аналогичны известным [2,3] в сплавах U мартенситным ориентационным соотношениям (ОСм):

$$(100)_{\alpha'} \parallel (111)_{\gamma}, (010)_{\alpha'} \parallel (11\bar{2})_{\gamma}, (001)_{\alpha'} \parallel (\bar{1}10)_{\gamma}$$

между исходной  $\gamma$ -фазой с ОЦК решёткой и  $\alpha'$ -мартенситом с орторомбической решёткой, если предположить замену фаз:  $\alpha \to \alpha'$  и  $\gamma \to \gamma'$ .

Отметим, что в сплаве U–1.5вес.%Мо параметры орторомбических решёток — α'–мартенсита (U– Mo) и α–фазы (U) не намного различаются между собой: 2.860 → 2.854 Å, 5.800 → 5.870 Å и 4.960 → 4.955 Å соответственно; точно также, как и параметры ортогональных решёток — исходной γ–фазы (ОЦК) и γ'–фазы U<sub>2</sub>Mo (ОЦТ): 3.481 → 3.420 Å, 9.859 Å (3 × 3.286 Å).

Из сравнения двух типов ОС следует, что упорядоченная  $\gamma'$ -фаза (U<sub>2</sub>Mo), единичная ячейка которой отличается от ОЦК-ячейки исходной  $\gamma$ -фазы утроенным параметром по высоте (ось упорядочения с) с одновременным сжатием по оси *c* на ~ 5.5% и по осям *a*, *b* на ~ 1.8%, сохраняет параллельность направлений главных осей *a*, *b*, *c* в своей решётке относительно решётки исходной  $\gamma$ -фазы. Но именно ось тетрагональности с [001] $\gamma'$  занимает кристаллографически неэквивалентное положение в ОСэ, что снижает число кристаллографически эквивалентных вариантов эвтектоидного распада в сравнении с образованием  $\alpha'$ -мартенсита — от 24 до 8.

1. Сокурский Ю.Н., Стерлин Я.М., Федорченко В.А., Уран и его сплавы, Атомиздат (1971).

2. Field R.D., Thoma D.J., Dunn P.S., Brown D.W., Cady C.M., Phil. Mag. 81,1691–1724 (2001).

#### Структура и энтропийные характеристики упорядочения квазикристаллических систем

Полянский Д.А.\*, Михалюк А.Н., Титов П.Л.

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия \*e-mail: polyanskiy.da@dvfu.ru

Целью работы является общее описание квазикристаллического упорядочения на базе энтропийного представления, а также попытка аналитически получить координаты атомов для конкретного квазикристаллического сплава. Рассматриваются квазикристаллические структуры квартетно– ортогональной симметрии и пентасимметрии, моделями которых являются *Q*–мозаика и мозаика Пенроуза.



Рис. 1. Квартетно–ортогональная (а) и пентасимметричная (б) мозаики и их древесно–графовые отображения (в), (г).

Для обеих мозаик были построены древесно–графовые отображения, рассчитана энтропия в форме Вайда, которая оказалась равной 0.83 и 0.8 соответственно, что выше, чем аналогичный параметр для кристаллографических решёток (0), но ниже для аморфных структур (0.9 и более), что указывает на промежуточное положение этих структур между аморфными и красталлическими.

Предложена новая, более компактная элементарная ячейка для декагонального пентасимметричного квазикристаллического покрытия, соответствующего ряду квазикристаллических сплавов, состоящая из двух декагонов (дорзального и звёздчатого). Координаты всех атомов получены в аналитическом виде. В частности выявлено, что все атомы расположены на пяти основных и четырёх промежуточных атомных поясах в точках пересечения с ними 19 абсцисс и 33 ординат.



Рис. 2. STEM–изображение 2–нм декагонального кластера Al<sub>72</sub>Ni<sub>2</sub>0Co<sub>8</sub> [1] (а), модель альтернативной элементарной ячейки и её атомной декорации (б), основные радиальные атомные пояса (в), определение координат атомов Ni (г).

При помощи двух элементарных декагонов процедура построения паркета Пенроуза может быть существенно упрощена в сравнении с плиточным уровнем, который использовался ранее. Алгоритм стыковки декагонов может быть описан тремя типами контактов и двумя типами дефектов. На плиточном уровне покрытие остаётся бездефектным.

1. Yan Y., Pennycook S.J., Nature (London) 403, 266–267 (1999).

#### Расчет характеристик ряда взрывчатых веществ

#### Празян Т.Л.

### Кемеровский государственный университет, Кемерово, Россия e-mail: prazyan.tigran@yandex.ru

Энергетические материалы широко используются для различных военных целей и промышленных приложений. Синтез и разработка новых энергетических материалов с более высокой производительностью и низкой чувствительностью к теплу, удару, трению и электростатическому разряду привлекают в последнее время значительный интерес.

Для поиска новых кандидатов в новые высокоэнергетические материалы очень важно предсказывать свойства и характеристики предлагаемых структур перед их экспериментальной проработкой, поскольку она связана с определенной опасностью и риском. Вычислительная модель вещества посредством молекулярного моделирования, анализ плотности зарядов и других характеристик являются надежным путем, предшествующим синтезу высокомолекулярных энергетических материалов с их высокой теплотой образования, благоприятной динамикой детонации, хорошей термической стабильностью и нечувствительностью к воздействию удара.

Целью настоящей работы является вычисление из первых принципов физико–химических свойств ряда как хорошо известных из литературных источников молекулярных структур  $C_3N_6O_6H_6$  (RDX),  $C_5N_4O_{12}H_8$  (PETN),  $C_6N_6O_6H_6$  (TATB),  $C_6N_3O_6H_3$  (TNB), так и вновь синтезированных  $C_3N_6O_6$  (TNTA), Si $C_5N_4O_12H_8$  (Si–PETN),  $C_2N_5O_2H_8$  и  $C_5N_5O_4H_8$  и выяснения на этой основе их детонационных свойств и параметров чувствительности к внешним воздействиям. Были получены: химическая энергия детонации Q, скорость детонации D, детонационное давление P, средняя молекулярная масса  $M_{ave}$ , число молей газообразных продуктов детонации на грамм взрывчатого вещества N, кислородный баланс OB, чувствительность к удару  $H_{50\%}$ , длины связей атомов A (A = C, N или O), соединенных с NO<sub>2</sub>, электростатический потенциал  $V_{mid}$ , ширина между верхней занятой молекулярной орбиталью и самой нижней незанятой молекулярной орбиталью  $E_g$ , энергия диссоциации  $E_D$ , а также новый фактор чувствительности — заселенность перекрывания связей  $P(A-NO_2)$ . Проведен анализ полученных результатов в сравнении с экспериментальными данными [1–3].

Для проведения компьютерных расчетов использовался пакет CRYSTAL09 [4], который в равной мере реализует возможности метода Хартри–Фока и теории функционала плотности. Использовался гибридный функционал B3LYP и базисные наборы [5]: C\_6–21G\*, H\_3–1p1G, N\_6–31d1G, O\_6–31d1.

- 1. Politzer P., Murray J.S., Central European Journal of Energetic Materials 8(3), 209 (2011).
- 2. Mader C.L., Numerical Modeling of Explosives and Propellants, CRC Press, placeCityBoca Raton (1998).
- 3. Meyer R., Kohler J., Homburg A., Explosives, Weinheim, Wiley-VCH (2007).
- 4. Dovesi R., Saunders V.R., Roetti C., Orlando R., Zicovich-Wilson C.M., Pascale F., Civalleri B., Doll K., Harrison N.M., Bush I.J., D'Arco Ph., Llunell M., CRYSTAL09 User's Manual, Torino, University of Torino (2010).
- 5. CRYSTAL Basis Sets Library, URL: http://www.crystal.unito.it/Basis\_Sets/Ptable.html (дата обращения 25.09.2014).

### Зависимость поверхности Ферми монослоя FeSe от параметров кристаллической структуры

Слободчиков А.А.\*, Некрасов И.А. Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: stalfear@gmail.com

Физика высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) вызывает неослабевающий интерес исследователей многие годы. Несмотря на то, что ВТСП в оксидах меди открыта давно, физическая природа сверхпроводимости в купратах до конца неясна, в частности есть трудности с описанием межэлектронных корреляций. Открытие в 2008 г. нового класса высокотемпературных сверхпроводников — слоистых соединений на основе железа — дает новые надежды на понимание механизма сверхпроводимости. Сегодня к ВТСП на основе железа можно отнести системы типа *RE*OFeAs (*RE* = La, Ce, Pr, ...), *A*Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> (*A* = K, Ba, Sr, ...), системы LiFeAs, FeAs(Te) и многие другие.

Экспериментально установлено [1], что ферми–поверхность в монослое FeSe отличается от такой объемного соединения отсутствием центрального цилиндра в точке Г. Мы предположили, что изменение поверхности Ферми можно объяснить изменением параметров кристаллической структуры монослоя FeSe, что может моделировать, например, приложение давления.

Исследование электронной структуры монослоя FeSe проводилось при помощи моделирования в программном пакете Quantum–Espresso [2], основанного на теории функционала электронной плотности (DFT) с использованием псевдопотенциалов. FeSe обладает наиболее простой кристаллической структурой (*P4/nmm*) среди ВТСП на основе железа. Температура сверхпроводящего перехода составляет 8 К [3]. Кристалл состоит из тетраэдров, в вершинах которых находятся атомы селена, а в центрах — атомы железа.

В данной работе изменение параметров кристаллической структуры осуществлялось с помощью варьирования на  $\pm 5\%$  параметра решетки *а* и высоты атомов Se над плоскостью железа  $z_{Se}$ . Результаты расчетов демонстрируют, что вид поверхности Ферми меняется при изменении кристаллических параметров, однако центральный цилиндр в точке Г сохраняется. Поэтому можно сделать вывод, что изменение параметров кристаллической структуры недостаточно для описания экспериментально наблюдаемого явления.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 14–12–00502.

- 1. Defa Liu et al., Nature Communications 3, 931 (2012).
- 2. Paolo Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter 21, 395502 (2009).

3. Hsu F-C et al., PNAS 105, 38 (2008).

#### Спинодаль растянутого кристалла: теоретический расчет и компьютерный эксперимент

#### Типеев А.О.

#### Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия e-mail: tipeeff@ya.ru

Проведено теоретическое и компьютерное исследование границы термодинамической устойчивости однокомпонентной системы на модели леннард–джонсовского кристалла с гранецентрированной кубической решеткой (ЛД ГЦК), состоящего из 32000 частиц.

Получена теоретическая зависимость давления ЛД ГЦК идеального кристалла от плотности и температуры вида  $p(T,\rho) = T\rho - \beta\rho^3 + \alpha\rho^5$ , где  $\alpha = 24.26$ ,  $\beta = 28.85$ . При T = const минимумы функции  $p(T,\rho)$  локализованы в диапазоне плотностей  $\rho^* = \rho\sigma^3$  от 0.84 до 0.85 ( $\sigma$  — линейный параметр потенциала взаимодействия) и представляют собой спинодаль растянутого кристалла.

В молекулярно–динамическом эксперименте исследовано спонтанное плавление растянутого ЛД ГЦК кристалла. Расчеты проведены в *NVE* ансамбле при пяти значениях температур  $T^* = k_{\rm B}T/\epsilon = 0.3, 0.4, 0.55, 0.7, 0.85$  ( $k_{\rm B}$  — постоянная Больцмана,  $\epsilon$  — энергетический параметр потенциала взаимодействия) в областях положительного и отрицательного давления. Заход в метастабильную область производился путем изотермического растяжения кристалла (линейного увеличения размеров ячейки). Рассчитана барическая и плотностная зависимости частоты зародышеобразования при плавлении.

Обнаружено, что при температурах  $T^* < 0.4$  возможно существование кристалла в лабильной области  $(\partial p/\partial \rho)_T < 0$  без потери пространственной однородности. Разрушение кристалла происходит вследствие спонтанного возникновения кавитационного пузырька.

Рассчитаны изотермические модули упругости кристалла, показано их монотонное убывание по мере увеличения степени метастабильности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14–08–31761) и Программы УрО РАН П1 (проект № 12–П–2–1008).

#### ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ В ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕ ЭНЕРГИИ

Писарев П.В., Федоровцев Д.И.\*

### Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия \*e-mail: d.fedorovtcev@gmail.com

Эксплуатация современных подземных сооружений и конструкций связана с интенсивными динамическими нагрузками и неблагоприятными условиями их эксплуатации. Современных изоляционных материалов недостаточно ввиду их скорого изнашивания. В тех местах, которые подверглись деформации, начинается электрохимическая коррозия. С данной проблемой можно справиться путем разработки инновационных высокотехнологичных средств защиты на базе электрохимзащиты (ЭХЗ). Разработка комплекса мер существенно продлит сроки эксплуатации и снизит расходы на проведение обслуживания и ремонтных мероприятий.

В рамках исследований был предложен альтернативный вариант генератора электрической энергии для ЭХЗ трубопроводов ОАО «Газпром» с минимальной стоимостью обслуживания при неизменных выходных характеристиках на основе Пельтье элемента.

Основной целью работы является численное моделирование теплообменных процессов в предложенном генераторе энергии и его последующая модификация. Для достижения поставленной цели были решены следующие вопросы: конструирование корпуса камеры термопреобразования и элементов конструкции, разработка методики численного расчета [1,2] и численное моделирование отвода тепла в термоэлектрическом преобразователе энергии в связанной постановке. Численный эксперимент проводился с использованием многопроцессорного вычислительного комплекса.

Ввиду симметрии геометрии расчет проводился на отдельном сегменте, что позволило сократить время расчета и сэкономить вычислительные ресурсы. Задача решалась в связанной постановке, поэтому сегмент был разбит на три области: область газодинамического расчета (истечение продуктов сгорания), область расчета конвективного охлаждения радиаторов, расчет теплопроводности в термоэлетропреобразователе–радиаторе–твердотельная конструкция. Для объединения решения газодинамического расчета и расчета теплообмена задан интерфейс на сопряженных сторонах расчетных областей.

По результатам численных экспериментов получены распределения полей температуры, давления и скорости в различных плоскостях и сечениях. Температура на охлаждающих радиаторах слишком высока 936–839 К (требуемая 400 К). При этом температура возрастает в направлении течения продуктов сгорания. Данные значения температур обуславливаются режимами подачи продуктов сгорания, интенсивностью системы охлаждения радиаторов, а также образованием избыточного давления на выходе из горячего корпуса. В целях получения значений температур, близких к требуемым, в дальнейшем планируется провести исследование теплообменных процессов с уточненными режимами подачи подачи подуктов сгорания и охлаждения радиаторов.

1. Писарев П.В., Модорский В.Я., Соколкин Ю.В., Механика и процессы управления 1, 123 (2011).

2. Писарев П.В., Зимин Д.В., Модорский В.Я., Соколкин Ю.В., Механика и процессы управления **1**, 127 (2011).

#### ФАЗОВАЯ КАРТИНА, ЗЁРЕННЫЙ ЛАНДШАФТ, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФЕРРИТА ВИСМУТА С ДОБАВКАМИ ТЕРБИЯ

Хасбулатов С.В.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия e-mail: said\_vahaevich@mail.ru

Феррит висмута является одним из наиболее известных сегнетомагнетиков — материалов, одновременно сочетающих магнитные и сегнетоэлектрические свойства. Соединения на основе феррита висмута привлекательны не только в прикладном плане благодаря высоким значениям электрического ( $T_{\rm C} = 1083$  K) и магнитного ( $T_{\rm N} = 643$  K) упорядочений, но и с фундаментальной точки зрения ввиду того, что в них наблюдается сильная взаимосвязь структуры и микроструктуры с магнитными и электрическими свойствами. Однако, как известно, эта взаимосвязь возможна лишь при условии подавления пространственно-модулированной магнитной структуры, чего, в свою очередь, можно добиться путем замещения Ві редкоземельными элементами (РЗЭ). Введение РЗЭ также позволяет стабилизировать структуру феррита висмута и оптимизировать его свойства. В настоящей работе ставится цель выявить закономерности формирования фазовой и поликристаллической (зеренной) структур, тепло– и электрофизических свойств керамических образцов твердых растворов (ТР) феррита висмута при замещении висмута тербием.

Объектом исследования выступили керамики состава  $Bi_{1-x}Tb_xFeO_3$  (где x = 0.05-0.20,  $\Delta x = 0.05$ ). Рентгенофазовый анализ, проведенный при комнатной температуре, показал, что TP  $Bi_{1-x}Tb_xFeO_3$  испытывают переход из ромбоэдрической (Pə) фазы, характерной для феррита висмута, в морфотропную область (MO), содержащую смесь Pэ и ромбической с моноклинной (M) подъячейкой фаз (последняя — типа GdFeO\_3, реализуемая в соединениях LnFeO\_3). Также было показано, что все исследованные TP содержат небольшое количество примесных фаз, среди которых  $Bi_{25}FeO_{40}$  (симметрия кубическая),  $Bi_2Fe_4O_9$  (симметрия ромбическая), обычно сопутствующих образованию  $BiFeO_3$ , и фазы со структурой типа граната  $Ln_3Fe_5O_{12}$  (симметрия кубическая). По мере увеличения концентрации Tb в системе относительная интенсивность сильной линии примесной фазы в целом уменьшается. При этом абсолютный минимум содержания примесей, равный 5%, соответствует MO исследованных составов.

При исследовании фазовой и зеренной структур, электрических и диэлектрических свойств мультиферроиков вида  $Bi_{1-x}Tb_xFeO_3$  при комнатной температуре были установлены закономерности их формирования, указаны условия усиления диэлектрических свойств изученных объектов.

Высокотемпературные исследования относительной диэлектрической проницаемости ( $\epsilon/\epsilon_0$ ), теплопроводности ( $\lambda$ ), коэффициента теплового расширения ( $\alpha$ ) и ряда других теплофизических (термодинамических) свойств позволили выявить две температурные области, в которых рассматриваемые зависимости испытывают аномалии разных типов. В первой области (500–600) К наблюдаются сильно дисперсионные и размытые максимумы ( $\epsilon/\epsilon_0$ ), имеющие релаксационный характер, а также минимум  $\alpha(T)$  TP с x = 0.10 и излом кривых зависимостей  $\lambda(T)$  образцов TP с x = 0.05 и x = 0.10. В окрестности второй температурной области, включающей  $T_N$ , «поведение» всех теплофизических характеристик экстремально при полном отсутствии отклика на зависимостях ( $\epsilon/\epsilon_0$ ) всех исследованных TP.

Было установлено, что  $T_N$  в TP системы  $Bi_{1-x}Tb_xFeO_3$  не испытывает значительного смещения при изменении x. Сделано предположение о существовании в области температур аномального «поведения» теплофизических характеристик неких структурных неустойчивостей, оказывающих помимо магнитного упорядочения влияние на наблюдаемые эффекты.

### Конкуренция зарядового и спинового упорядочения в модельном купрате

Чиков А.А.\*, Аввакумов И.Л., Москвин А.С.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: alex.chikov@yandex.ru

На экспериментальных фазовых диаграммах высокотемпературных сверхпроводников всегда присутствуют антиферромагнитная фаза и некоторый набор переплетенных между собой («intertwined») зарядово–упорядоченных фазовых областей [1]. В рамках псевдоспинового формализма [2] методом Монте–Карло и в приближении молекулярного поля нами рассмотрены эффекты зарядового и спинового упорядочения в модельном купрате типа  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ , являющемся одним из классических объектов исследования высокотемпературной сверхпроводимости. В рамках псевдоспинового формализма пространство состояний на узлах решетки модельного купрата, неустойчивого относительно переноса заряда [3], сводится к трем возможным валентным состояниям ионов меди  $Cu^{1+,2+,3+}$ , которые связываются с тремя возможными состояниями псевдоспина S = 1:  $M_S = -1, 0, +1$  соответственно. Основные состояния ионов  $Cu^{1+,3+}$  бесспиновые, тогда как для  $Cu^{2+} s = 1/2$ , так что оператор проектирования  $1 - S_z^2$  определяет спиновую плотность на узле. Простейший гамильтониан модельной системы, описывающий конкуренцию зарядовой и спиновой степеней свободы, может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \sum_{i} \Delta_{i} \hat{S}_{iz}^{2} - \sum_{i} h_{i} \hat{S}_{iz} + \sum_{i>j} V_{ij} \hat{S}_{iz} \hat{S}_{jz} + \sum_{i>j} I_{ij} (\hat{\mathbf{s}}_{i} \cdot \hat{\mathbf{s}}_{j}) (1 - \hat{S}_{iz}^{2}) (1 - \hat{S}_{jz}^{2}),$$
(1)

где параметр  $\Delta$  определяет энергию (2 $\Delta$ ) диспропорционирования: Cu<sup>2+</sup>+Cu<sup>2+</sup>  $\rightarrow$  Cu<sup>1+</sup>+Cu<sup>3+</sup>, второе слагаемое описывает эффект псевдомагнитного (в частности обычного электрического поля), а также и химпотенциал, третье слагаемое определяет притяжение электронных (Cu<sup>1+</sup>) и дырочных (Cu<sup>3+</sup>) центров, четвертое слагаемое описывает гейзенберговский обмен Cu<sup>2+</sup>–Cu<sup>2+</sup>. В рамках методов Монте–Карло и среднего поля нами рассчитывались корреляционные функции, определяющие как зарядовый, так и спиновый порядки в приближении взаимодействия ближайших соседей, приводящего к формированию шахматного зарядового и антиферромагнитного спинового порядков соответственно. Шахматный зарядовый порядок в данной работе рассматривается как предшественник сверхпроводимости и других типов зарядового упорядочения. Были построены фазовые диаграммы: параметры порядка — температура, однозначно указывающие на эффект антикорреляции зарядового и спинового упорядочения, что согласуется с известными экспериментальными фактами [4–7]. Также установлены области, в которых одна из фаз является метастабильной.

Работа частично поддержана грантом РФФИ № 12–02–01039 и Программой повышения конкурентоспособности ведущих университетов РФ (Соглашение с Минобрнауки РФ 02.А03.21.0006 от 27 августа 2013 г.).

- 1. Davis J.C., Concepts relating magnetic interactions, intertwined electronic orders and strongly correlated superconductivity, arXiv:1309.2719v1.
- 2. Moskvin A.S., The Physics of Metals and Metallography 95, 41 (2003).
- 3. Moskvin A.S., Phys.Rev. B 84, 075116 (2011).
- 4. Orenstein J., Millis A.J., Science 288, 468 (2000).
- 5. Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.X., Rev. Mod. Phys. 75, 473 (2003).
- 6. Norman M.R., Pépin C.P., Rep. Prog. Phys. 66, 1547 (2003).
- 7. Lee P.A., Nagosa N., Wen X.-G., Rev. Mod. Phys. 78, 17 (2006).

## Исследование интерфейсов многослойных структур Co/Cu методом ядерного магнитного резонанса

Чупраков С.А.\*, Банникова Н.С., Блинов И.В.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: st.krezz@gmail.com

Методом ядерного магнитного резонанса были исследованы структурные особенности интерфейсов сверхрешеток [Co/Cu]<sub>n</sub>, приготовленных методом магнетронного напыления. Проанализировано изменение структурных характеристик интерфейсов и магниторезистивных свойств сверхрешеток с увеличением числа бислоев [Co/Cu]<sub>n</sub>. Обнаружена корреляция между величиной магнитосопротивления и структурными характеристиками интерфейсов.

Сверхрешетки [Co(1.5 нм)/Cu(0.9 нм)]<sub>n</sub> (n = 10, 20, 40) были приготовлены методом магнетронного напыления на напылительной системе Ulvac MPS–4000–C6 на постоянном токе, используемые подложки — стекло. Для защиты поверхности сверхрешетки от окисления образец покрывался слоем Cr толщиной 3 нм. Буферный слой Fe имел толщину 5 нм.

Электронно–микроскопические исследования показали, что исследуемые сверхструктуры имеют нанокристаллическую структуру, средний размер нанокристаллитов в плоскости слоев составляет 25 нм.



Рис. 1. Зависимость доли атомов <sup>59</sup>Со, находящихся в «идеальных» интерфейсах от числа бислоев n.

Внутреннюю структуру границ можно характеризовать долей участков «совершенного» сопряжения в общей поверхности интерфейсов. Пик  $I_3$  характеризует атомы «идеального» интерфейса (Co/Cu), совпадающего с плотноупакованной плоскостью <111> ГЦК решетки, в котором каждый атом <sup>59</sup>Со имеет 3 ближайших соседа Сu. Предполагается, что вкладом конфигураций с числом ближайших соседей более 3 можно пренебречь. Следовательно, долю «идеального» интерфейса можно определить как  $I_3/(I_1 + I_2 + I_3)$ . Рис. 1 демонстрирует изменение этого параметра с ростом числа бислоев. Видно, что с увеличением числа бислоев доля участков идеального сопряжения уменьшается.

Таким образом, исследование магниторезистивных свойств структурных хараки теристик интерфейсов сверхрешеток стекло/Fe(5 нм)/[Co(1.5 нм)/Cu(0.9 нм)]<sub>n</sub>/Cr(3 нм) с различным числом пар слоев показало, что с увеличением количества бислоев величина магнитосопротивления уменьшается. При этом доля участков

«идеального» сопряжения также уменьшается.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Президиума РАН (Проект № 12–П–2–1051) и НШ №1540.2014.2.

## Исследование влияния величины поправки на двойной учет корреляционных эффектов на решение модели Эмери

Якупов Э.О.\*, Павлов Н.С., Некрасов И.А.

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия \*e-mail: edward.thrst@gmail.com

Соединения с сильными электрон-электронными корреляциями интенсивно исследуются в современной физике конденсированного состояния. Сильные корреляции обусловлены сравнимыми вкладами потенциальной энергии кулоновского взаимодействия и кинетической энергией электронов. Одним из успешных подходов теоретического описания таких систем является LDA+DMFT [1]. В LDA+DMFT на первом шаге производится первопринципный расчет электронной структуры в рамках приближения локальной электронной плотности (LDA). На втором шаге более точно учитываются корреляционные эффекты на сильнокоррелированных состояниях с помощью DMFT (теория динамического среднего поля) для решения модели Хаббарда. В таком подходе есть не вполне контролируемый внутренний параметр — поправка на двойной учет. Она возникает из-за того, что в LDAрешении содержится часть локального кулоновского взаимодействия, в том числе для сильнокоррелированных электронных состояний, для которых локальное кулоновское взаимодействие точно учитывается в рамках DMFT. Поэтому необходимо вычитать величину переучтенной энергии локального кулоновского взаимодействия, которая и является поправкой на двойной учет E<sub>dc</sub>. Проблема поправки на двойной учет связана с тем, что пока не существует микроскопического выражения в терминах модели Хаббарда для вклада локального кулоновского взаимодействия уже учтенного в LDA, и наоборот.

В данной работе проблема поправки на двойной учет рассмотрена на примере модели Эмери для соединения  $Nd_{2x}Ce_xCuO_4$  (NCCO) [2] с учетом хаббардовского взаимодействия только на  $Cu-3d_{x^2y^2}$  состоянии. В качестве solver'а в DMFT использовался метод квантового Монте–Карло. Величина хаббардовского взаимодействия U изменялась от 4.0 до 10.0 эВ, а значение поправки на двойной учет  $E_{dc}$  от 0.0 до 6.0 эВ. Анализ результатов произведен по величине перенормировки квазичастичной массы  $Z = m/m^*$ , которая вычислялась по формуле:

$$Z = \frac{1}{1 - \frac{\partial \operatorname{Im}\Sigma(\omega_n)}{\partial \omega_n}} \Big|_{\omega=0},\tag{1}$$

где  $\Sigma(\omega_n)$  — собственная энергетическая часть, а  $\omega_n$  — мацубаровская частота.

Было установленно, что при высоких значениях поправки на двойной учет и малых величинах кулоновского взаимодействия *U* наблюдается некоррелированная или слабокоррелированная металлическая фаза. С ростом *U* и уменьшением *E*<sub>dc</sub> корреляции усиливаются вплоть до диэлектрической области. Диэлектрическая область с ростом *E*<sub>dc</sub> смещается к большим значениям *U*.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 14-12-00502.

1. Kotliar G., Savrasov S.Y., Haule K., Oudovenko V.S., Parcollet O., Marianetti C.A., Rev. Mod. Phys. 78, 865 (2006).

2. Weber C., Haule K., Kotliar G., Phys. Rev. B. 82, 125107 (2010).

Биофизика

#### Динамическая спекл–интерферометрия как метод изучения метаболизма клеток с вирусом герпеса

Владимиров А.П.<sup>1,2</sup>, <u>Михайлова Ю.А.</u><sup>1,2\*</sup>, Малыгин А.С.<sup>1</sup>, Бородин Е.М.<sup>1</sup>, Бахарев А.А.<sup>2</sup>, Порываева А.П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия <sup>2</sup>Екатеринбургский научно-исследовательский вирусных инфекций, Екатеринбург, Россия \*e-mail: julia\_mikhailova2104@mail.ru

Перспективным инструментом для изучения микроскопических процессов, происходящих в биологических средах, является метод регистрации динамики лазерных спеклов или биоспеклов [1]. Спеклы (англ. speckle — крапинка, пятнышко) — случайная интерференционная картина, которая образуется при взаимной интерференции многих когерентных волн, имеющих случайные сдвиги фаз.



Рис. 1. Зависимость η от времени для культуры Vero: 1 — питательная среда, 2 — клетки, 3 — клетки, зараженные ВПГ–1.

Ранее на клеточной линии Л–41 была разработана спекл–интерферометрическая методика и установка для оценки метаболической активности культивированных клеток [2]. Целью настоящей работы является модернизация методики и изучение ее возможностей для анализа в реальном времени процесса развития герпеса.

Динамика спеклов регистрировалась в плоскости изображения монослоя клеток культур Л–41 (из крови больного моноцитарной лейкемией), ЛЭЧ–3 (из ткани легкого эмбриона человека), Vero (из почечной ткани африканской мартышки). Исследовались клеточные культуры, зараженные вирусом герпеса простого (ВПГ– 1).

В течение суток в режиме реального времени происходила регистрация цифрового значения оптического сигнала *I* в одном пикселе и параметра η, характеризующего изменение в распределении оптического сигнала на участках разме-

ром 10  $\times$  10 пикселей. Время экспонирования телекамеры составляло 9 с.

Зависимости  $\eta$  от времени для клеточных культур с вирусом и в отсутствие вируса существенно различаются (рис. 1). Как показал анализ экспериментальных данных, различие величины  $\eta$  для клеток и клеток, зараженных ВПГ–1, можно обнаружить через 10 минут после начала эксперимента.

1. Rabal H.J., Braga Jr. R.A., Dynamic Laser Speckle and Applications, CRC Press (2008).

2. Малыгин А.С., Бебенина Н.В., Владимиров А.П., Микитась К.Н., Бахарев А.А., ПТЭ 3, 124 (2012).

#### Изучение температурных свойств фибриллярного α–кератина методом электронного парамагнитного резонанса

<u>Мишинкина Е.А.</u>\*, Байтимиров Д.Р., Конев С.Ф., Исакова К.Е., Деветьяров К.А., Черепанова Е.А.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия \*e-mail: kat\_m27@mail.ru

Понимание фундаментальных основ и использование в повседневной практике явлений, обусловленных наноразмерными эффектами, становится все более важным и актуальным. Во многом оно приходит при исследовании функционирования биологических структур на молекулярном уровне. Одним из таких объектов исследования является человеческий волос, имеющий преимущественно белковый состав, содержание которого составляет до 95%. Известно, что белковый материал волоса обладает парамагнитным откликом, вклад в который вносят две подсистемы: белок кератина и биополимер меланин [1]. Однако природа возникновения этого сигнала остается неизвестной, что затрудняет поиск связи ЭПР–характеристик волоса по структурным изменениям белка. В связи с этим целью данной работы являлось выяснение природы широкого сигнала ЭПР меланопротеинового волокна. Для этого были проведены исследования методом ЭПР в температурном диапазоне 90–310 К образцов волос различной пигментации и порошка α–кератина, извлеченного из них.

В результате установлено, что температурная зависимость обратной интегральной интенсивности волос и порошка кератина, полученного из образцов волос различной пигментации, демонстрирует схожее поведение, характеризуемое наличием температуры стеклования и линейным участком, который может быть описан зависимостью Кюри типа. При этом температура стеклования для светлого волоса выше  $T_c$  темного волоса на 30 К, что может быть связано с индивидуальной особенностью образца. Проведенные сравнения показали, что имеется сдвиг  $T_c$  на 10 К для образца волоса и порошка кератина (рис. 1), что может быть связано со структурными особенностями образцов.



Рис. 1. Характерная зависимость  $I^{-1} = (T)$  ЭПР волоса.

Также на всех образцах наблюдается увеличение ширины сигнала ЭПР при уменьшении температуры, что также подтверждает стеклование филаментарной структуры кератинового волокна.

Основной вклад в спектр ЭПР образцов волоса и кератинового порошка вносят ЭПР центры одинаковой природы. Эти центры, обуславливающие широкий сигнал ЭПР волоса, связаны с меланопротеиновым волокном и локализованы в его филаментарной структуре. Таким образом, было показано, что ЭПР сигнал фибриллярного α–кератина связан с парамагнитными центрами, расположенными в структурообразующих фрагментах белка, и основной вклад в него вносят ЭПР центры, возникающие при взаимодействии аминокислотных остатков соседних диме-

ров в процессе формирования филаментарной структуры волоса.

1. Baitimirov D.R., Starichenko D.V., Pravihkina T.A., Konev S.F., Shvachko Yu.N., Fibre Chemistry **38**, 49–54 (2006).

#### Авторский указатель

F. Guillou, 51 Henaish A.M.A., 213 Yasin S., 205 Zherlitsyn S., 205 Абакумова Н.Н., 35, 44 Абашев Р.М., 147 Абубакаров А.Г., 109 Абубакр А.Ф, 157 Абухасва А.С., 91 Аввакумов И.Л., 244 Аверкиев H.C., 205 Агзамова П.А., 110 Аданакова О.А., 36, 37 Азаркевич Е.И., 173 Акшенцев Ю.Н., 125 Алероев М.А., 177 Алиев И.М., 123 Алихаджиев С.Х., 124 Ананченко Д.В., 178, 187 Андбаева В.Н., 158, 166 Андреев С.В., **42** Андреева А.Ю., 38, 217 Аникин М.С., 39, 40 Аникина И.Н., 39 Аннаоразов М.П., 80 Антонова О.В., 77 Арапов Ю.Г., 96, 103, 209 Арапова И.Ю., 111 Аржников А.К., 233, 236 Афонин Ю.Д., 222 Ашхотов О.Г., 177 Ашхотова И.Б., 177 Бабушкин А.Н., 86, 87 Багазеев А.В., 173 Байтимиров Д.Р., 250 Бакланова Я.В., 111 Балымов К.Г., 37 Банникова Н.С., 245 Баранов Н.В., 48, 91 Барышников К.А., 205 Баскес М., 49 Батаев Д.С., 59, 60 Бахарев А.А., 249 Бахарев С.М., 229 Бекетов И.В., 54, 173 Бекин Н.А., 117 Белозерова К.А., 45, 206

Берсукер И.Б., 205 Бессонова В.А., 171 Благодатков Д.В., 197 Блинов И.В., 245 Блинова Ю.В., 125 Бобенко Н.Г., 196 Бобин С.Б., 94 Бобров К.С., <mark>16</mark>4 Боголюбский А.С., 92 Божко А., 65 Болдырев Н.А., 69 Болтачев Г.Ш., 179, 180 Болячкин А.С., 58 Бородин Е.М., 249 Бузлуков А.Л., 111 Буйнова Л.Н., 128 Бунтов Е.А., 137, 138 Бучкевич А.А., 41 Бушуев М.Б., 38 Вайнштейн И.А., 182, 188, 190, 213, 222 Валеева А.А., 182 Васин М.Г., 17, 70 Васьковский В.О., 36, 37 Вербенко И.А., 230 Верховский С.В., 111, 114 Владимиров А.Б., 151 Владимиров А.П., 249 Власов М.И., 147 Власова А.М., 126 Волегов А.С., 48, 52, 58 Волков А.Ю., 77 Волков В.А., 130 Волков К.Д., 42 Волков Н.Б., 174, 179 Волков Н.В., 18 Волкова З.Н., 112-114 Волосников Д.В., 19 Волчков С.О., 201 Вомпе Т.А., **43** Воробьёва Н.С., 223 Воронова Л.М., 127 Вохминцев А.С., 182, 188, 190, 213, 222 Втулкина Е.Д., 181 Вшивков C.A., 46, 82 Выходец В.Б., 93, 136 Выходец Е.В., **93** Гаан К.В., 143

Габай А.М., 52 Гавико В.С., 50, 142 Гагарская М.А., 45 Гаевский А.Ю., 148 Галахов В.Р., 193, 220 Галимзянов Б.Н., 231 Галкин Д.А., 159 Галлардо С., 53 Галяс А.Г., 46, 82 Гапонцев В.В., 232 Гапонцев В.Л., 20 Гапонцева Т.М., 127 Гашков М.А., 169, 172 Герасимов Е.Г., 50 Геращенко А.П., 111 Гервасьева И.В., 135 Гермов А.Ю., 112, 114 Гижевский Б.А., 21, 193, 220 Гильмутдинов В.Ф., 233, 236 Гимаев А.В., 234 Говоркова Т.Е., 94 Голдырева Е.И., 112, 113 Голентус И.Э., 148 Голуб В., 65 Горбачёв И.И., 71, 78 Горшенков М., 65 Горьковенко А.Н., 36 Гохфельд Н.В., 128 Гребенников В.И., 56 Грибов И.В., 219 Гринберг Б.А., 126 Грицевич М., 133 Гришина К.А., 160, 165, 166 Гроховский В.И., 133 Губкин А.Ф., 53 Гудина С.В., 92, 96, 103, 209 Гудков В.В., 205 Гумеров А.М., 35, 44 Гущина Н.В., 127 Давыдов Д.И., 129 Дашин Н.А., **214** Деветьяров К.А., 250 Дегтярев М.В., 125, 127 Демокритов С.О., 22 Денисова Т.А., 111 Дерюшкин В.В., 94 Дильмиева Э.Т., 51 Долгих С.М., 143 Дорошева И.Б., 182 Дробот А.В., 183 Дровосеков А.Б., 197

Дышлюк А.В., **215** Дёмин А.М., 23 Егорушкин В.Е., 196 Елин А.С., 72 Елсуков Е.П., 189 Елфимова Е.А., 181, 184, 195, 198 Елькин И.А., **130** Емельянова С.М., 45 Ефимова Е.Д., 73 Жарков А.В., 74 Жевстовских И.В., 205 Жернов И.В., **46** Живулин В.Е., 47 Жукавин Р.Х., 117 Жуков А., <mark>62–64</mark> Жукова В., <u>62–64</u> Журавлев А.К., 24 Журавлев К.С., 218 Зайкова В.Е., 95 Закирьянов Д.О., 235 Зацепин А.Ф., 137, 138 Заяц С.В., 170 Звездин А.К., 30 Звонарев С.В., 178, 187, 191 Зельдович В.И., 143 Зинин А.В., 39, 40, 42 Злобина Н.А., 47, 216 Золотарёва Г.Р., 185 Зубарев А.Ю, 157 Зубарев Н.М., 169, 172 Зуев Ю.Н., 237 Ибрахим П.Н.Г., 48 Иванов А.А., 101, 102 Иглесиас И., 49 Игошев П.А., 236 Инишев А.А., <mark>50</mark> Ипатов М., 62, 63 Ирхин В.Ю., 236 Исакова К.Е., 250 Ищенко А.В., 190, 225 Кабанова И.Г., 237 Кадырова Н.И., 98 Каинума Р., 65 Кайгородов А.С., 131, 170 Камаева Л.В., 75 Камалов Р.В., 182, 188 Каманцев А.П., 51 Канажевский В.В., 217 Карачевцева А.В., 207 Карпенков Д.Ю., 59, 60 Катаев В.А., 194

Кебец А.В., 170 Кесарев А.Г., **186** Киряков А.Н., 178, 187 Киселев В.В., **57** Клепикова А.С., 92, 96 Клумов Б.А., <mark>81</mark> Клюкина М.Ф., 237 Ковалев Е.В., 132 Когоут Т., 133 Кожевина А.В., **188** Коледов В.В., **51** Колодкин Д.А., 189 Колядина Л.И., 190 Комарский А.А., 171 Кондратьев В.В., 186 Кондрин М.В., **55** Конев С.Ф., 250 Конкин Д.А., 214 Константинов В.А., 207 Корженевский С.Р., 171 Королев А.В., 25, 52 Коростелин В.Ю., 205 Коротаев Е.В., 38, 217 Кортов В.С., 178, 187, 191 Корх М.К., 149 Корх Ю.В., 150, 151 Косых А.С., 190 Котов А.Н., 161 Коуров Н.И., 206 Кочурин Е.А., 169, 172, 180 Кравцов Е.А., 197 Кравченко Н.Г., 132 Крейнес Н.М., 197 Кривонос Ю.И., 170 Криницин В.В., 171 Криницина Т.П., 125 Кругликов Н.А., 133 Крымшокалова Д.А., 177 Кубрин С.П., 69 Кудрявцев Р.В., 35, 44 Кудрявцев Ю.А., 53 Кузнецов В.Л., 171 Кузнецов Д.Д., 134 Кузнецов Д.К., 79 Кузнецова Е.И., 125 Кулеев И.Г., 229 Кулеев И.И., 229 Кулеш Н.А., 37 Куликовский А.В., 208 Курляндская Г.В., 54, 194, 201 Курмаев Э.З., 220

Курочка К.В., 95 Курённых Т.Е., 93, 136 Кучин А.Г., 52 Ладьянов В.И., 75 Ландман А.И., 205 Лапшина Н.С., 116 Лейтинен Е., 133 Лепаловский В.Н., 36, 194, 201 Лисенков В.В., 199, 200 Литвинов P.B., 214 Лобанов Д.Н., 117 Ломаев И.Л., **186** Лончаков А.Т., 94 Лопес М., **53** Луговых А.М., 53 Лукманова А.М., 191 Лукьянов К.В., 161 Лупицкая Ю.А., 97, 105 Лянге М., 65 Макаров В.Ф., 139 Макаров С.В., 192 Макарова Г.М., 52 Макрушина А.Н., 192 Максименко А.Л., 180 Малахова Н.А., 190 Малин Т.В., **218** Малыгин А.С., 249 Мамаев А.С., 131 Марченков В.В., 45, 206 Марченкова Е.Б., 45 Махинько Ф.Ф., 127 Маширов А.В., **51** Медведев А.И., 173 Медведева И.В., 26, 27 Мельникова Н.В., 85-87, 95, 98, 106, 196 Менщикова Т.К., 41 Меньшикова М.А., 76 Меренцов А.И., 28, 91, 223 Месилов В.В., 193 Микаилзаде Ф.А., 30 Мильман И.И., 147 Милютин В.А., **135** Миляев И.М., 43 Мирзорахимов А.А., 98 Михайлова Ю.А., 249 Михалев К.Н., 111-113 Михалицына Е.А., 194 Михалюк А.Н., 238 Мишинкина Е.А., 250 Модорский В.Я., 118 Можчиль P.H., 223

Моисеев К.Д., 53 Мокшин А.В., 231 Монахов А.М., 205 Морозова Е.В., **99** Морозова Н.В., 232 Москвин А.С., 244 Мурзакаев А.М., 173 Муртазин Р.Р., 35 Мутхуселвам И.П., 61 Мушников Н.В., 50, 142 Назипов Д.В., 110 Нарсинга Рао Г., 61 Наумов С.В., 41, 84, 193, 206 Неведомский В.Н., 53 Неверов В.Н., 92, 96, 103, 209 Некрасов И.А., 240, 246 Нефёдова О.А., 93 Нехорошкова Ю.Е., 195 Никифоров А.Е., 110, 141 Ничипурук А.П., 149, 152 Новикова В.Ф., 97 Новикова О.С., 77 Новоселова Ю.П., 54 Носков Р.Е., 115, 116 Нугаева Л.Л., 85-87 Обухов С.И., 93, 136 Овсянников С.В., 232 Овчинников В.В., 127 Огнева М.С., 152, 154 Окубо А., <mark>65</mark> Окулов В.И., 53, 94 Орлов Л.К., 100 Орлов М.Л., 100, 117 Осадченко В.Х., 39 Осинных И.В., 218 Осипов В.В., 199, 200 Охтсука М., 65 Павленко А.В., 69 Павлов Н.С., 246 Панков А.С., 162 Панкратов Н.Ю., 29 Паранин С.Н., 170 Пасынков А.Ю., 71, 78 Патраков Е.И., 45 Пелленен А.П., 59, 60 Перевозчикова Ю.А., 137, 138 Перегудова Н.Н., 217 Песин Л.А., 47, 216 Песин М.В., 139, 140 Петров В.П., 110, 141 Петросян Т.К., 79

Петухов Д.С., 101, 102 Петухова О.Е., 101, 102 Печеркина Н.Л., 237 Пилюгин В.П., 125-128, 134 Писарев П.В., 118, 119, 242 Писарев Р.В., 119 Пичугин А.Ю., 217 Платонов В.В., 199, 200 Платонов С.П., 52 Плотников В.А., 192 Подгорных С.М., 209 Подкин А.В., 199, 200 Полянский Д.А., 238 Пономарев А.Н., 196 Поплавной А.С., 132 Попов В.В., 134 Попов М.Р., 103 Попова Е.Н., 134 Попова О.Е., 206 Порсев В.Е., 189 Портнов Д.С., 173 Порываева А.П., 249 Празян Т.Л., 239 Пронин А.А., 55 Прудников П.В., 72, 76 Пряничников С.В., 153 Пушин В.Г., 128 Пятаков А.П., 30 Радзивончик Д.И., 56 Расковалов А.А., 57 Рачёва Е.А., 134 Ревякин В.П., 207 Резнишких О.Г., 84 Ремпель А.А., 182 Ригмант М.Б., 149 Родионов В.В., 80 Родионова В.В., 49, 62-65, 80 Рудов Ф.В., 183, 185 Русаков Г.М., 73 Рыльцев Р.Е., 81 Рябухина М.В., 197 Савельев А.П., 209 Савин П.А., 36 Савицкий А.О., 197 Саган В.В., 207 Сагарадзе В.В., 237 Сажина Е.Ю., 154 Саламатов Ю.А., 219 Саматов О.М., 54 Санкар Р., 61 Сараева С.Ю., 190

Сарычев М.Н., **205** Сафронов А.П., 54 Свалов А.В., 37 Свяжин А.Д., 220 Седнев А.Л., 104 Селезнева Н.В., 48, 91 Сибатов Р.Т., 99 Скоков К.П., 59, 60 Скрипов П.В., 19, 159 Слободчиков А.А., 240 Смирнова Д.А., 115 Смотрицкий А.А., 163 Солиман Т.С., 82 Соловьева А.Ю., 198 Сомова В.М., 154 Спирина А.В., 221 Старостин А.А., 19, 161, 163 Сташков А.Н., 150, 152, 154 Сташкова Л.А., 142, 154 Степанова Е.А., 37 Столбовский А.В., 134 Стрельцов С.В., 61 Сударева С.В., 125 Султанов О.А., 120 Сухоруков Ю.П., 41 Сыроквашин М.М., 38, 217 Сысолятина Л.В., 58 Сюрдо А.И., 147 Тарасов Е.Н., 39, 40, 42 Таскаев С.В., 59, 60 Тахавиев И.Д., 83 Тебеньков А.В., 85, 86 Телегин А.В., 31, 41 Телегин С.В., 84, 193, 206 Терентьев П.Б., 50, 52, 142 Тимиргазин М.А., 233, 236 Типеев А.О., 164, 241 Титов А.Н., **223** Титов П.Л., **238** Тихомирова Г.В., 74, 79 Тихонов Е.В., 199, 200 Томило В.А., 170 Торопова П.В., 221 Турышева Е.В., 184 Ульянов А.Л., **189** Ульянов М.Н., **59**, **60** Уметсу Р.И., 65 Устинова И., <mark>98</mark> Ушаков А.В., <mark>61</mark> Федоров В.А., **41** Федоровцев Д.И., 242

Филиппов А.Л., 85 Филоненко Е.М., 97, 105 Фролова Н.Ю., 143 Халода Дж., 133 Харус Г.И., 102 Хасбулатов С.В., 243 Хейфец А.Э., 143 Хейфец О.Л., 85-87 Ховайло В.В., 59, 60, 64, 65 Хотиенкова М.Н., 158, 165, 166 Хуснутдинов Р.М., 83 Цветов Д.С., 104 Чайкин Д.В., 222 Чарикова Т.Б., 53, 101, 102 Чащухина Т.И., 127 Чепусов А.С., 171 Черепанова Е.А., 250 Чернышёв В.А., 110, 141, 235 Чиков А.А., 244 Чингина Е.А., 174, 179 Чичай К.А., 49, 62-65 Членова А.А., 201 Чоу Ф.К., 61 Чулкина А.А., 130 Чупахина Т.И., 106 Чупраков С.А., 245 Шавров В.Г., 51 Шакиров Э.Ф., 85 Шакирова Г.Д., 219 Шамин С.Н., 193, 220 Шастин В.Н., 117 Шевырталов С., 64, 65 Шелушинина Н.Г., 96, 101-103 Шкварин А.С., 28, 223 Шорохов Е.В., 143 Штерн М.Б., 180 Шульгин Б.В., 225 Щелкачев Н.М., 32, 81 Щелкунов Н.М., 224 Щенников В.В., 232 Эл Каммуни Р., 49 Юрасов Д.В., 117 Яблонский А.Н., 117 Ягодин В.В., 225 Яковлева Е., 106 Якубовский А.Ю., 113, 114 Якунин М.В., 96, 103, 209 Якупов Э.О., 246 Ямпольский А.Д., 163

### Институт физики металлов УрО РАН



Директор Института, академик РАН, УСТИНОВ Владимир Васильевич



#### http://www.imp.uran.ru

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

620990 г.Екатеринбург, ул. С.Ковалевской 18, e-mail: physics@imp.uran.ru

измерений; механических испытаний; сектор криожидкостных технологий







#### 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 трём 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.





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

<u>www. urfu.ru</u>

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». Девиз Института–«*Образование на все времена!*».



Директор института - кандидат физико-математических наук Владимир Венедиктович Кружаев. Объединение трех факультетов усилило интеграцию научных лабораторий и центров. ИЕН – лидер среди институтов УрФУ по объему фундаментальных научных исследований и по числу статей.

**Физико-технологический институт УрФУ (ФТИ)** включает 13 кафедр по 15 специальностям в области физико-химических, физико-технических и информационных технологий, социально-гуманитарных коммуникаций, управления качеством инновационных продуктов и технологий.



Директор института - профессор, доктор химических наук Владимир Николаевич Рычков. ФТИ – это особый «физтеховский» образовательный и научный процесс, лидер по объему прикладных исследований, направленных на решение проблем российской энергетики, медицины и экологии. Недавно стартовал инновационный проект института в СКОЛКОВО.

#### Основные партнеры УрФУ:

Институты РАН в рамках специализированных научно-образовательных центров, отраслевые институты Росатома и РФЯЦ ВНИИТФ и др. Совместные научные исследования проводятся с учеными десятков университетов из Топ-200 мировых рейтингов.

УрФУ – 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 XV Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества г. Екатеринбург, 13—20 ноября 2014 г.



УДК 538.9(043.2) ББК 22.37я431

Материалы школы-семинара публикуются в авторской редакции

Ответственные за выпуск — П.А. Игошев, З.Н. Волкова, Д.И. Радзивончик Оформление — В.В. Гапонцев, З.Н. Волкова Отпечатано на ризографе ИФМ УрО РАН Заказ № 58. Тираж 52 экз. Усл.-печ. л. 32,5

> ИФМ УрО РАН 620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18 тел. (343) 378-38-65 e—mail: spfks@imp.uran.ru