

Уральское отделение РАН  
Институт физики металлов УрО РАН  
Институт теплофизики УрО РАН

**XI ВСЕРОССИЙСКАЯ МОЛОДЁЖНАЯ ШКОЛА-СЕМИНАР**  
по проблемам физики конденсированного состояния вещества

*Мезисви  
докладов*

15 - 21 ноября 2010 г.

Екатеринбург  
2010 г.

## **Финансовая поддержка**

- \* Российский Фонд Фундаментальных Исследований
- \* Фонд некоммерческих программ «Династия»
- \* Уральское отделение Российской Академии Наук
- \* Институт физики металлов УрО РАН
- \* Институт теплофизики УрО РАН
- \* Министерство образования и науки Российской Федерации

## **Оргкомитет**

- \* Арапова Ирина Юрьевна — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (председатель)
- \* Валиуллин Андрей Ильдарович — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (зам. председателя оргкомитета)
- \* Кругликов Николай Александрович — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (учёный секретарь)
- \* Гудин Сергей Анатольевич — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- \* Гудина Светлана Викторовна — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- \* Гапонцева Наталья Николаевна — ИФМ УрО РАН
- \* Тихомирова Галина Владимировна — к.ф.-м.н., УрГУ
- \* Гапонцев Владимир Витальевич — ИФМ УрО РАН
- \* Гапонцева Татьяна Михайловна — ИФМ УрО РАН
- \* Блинова Юлия Викторовна — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- \* Ширилкина Ирина Геннадьевна — к.т.н., ИФМ УрО РАН

## **Научный комитет**

- \* Сташков Алексей Николаевич — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (сопредседатель)
- \* Пронин Алексей Алексеевич — к.ф.-м.н., ИОФ им. Прохорова (сопредседатель)
- \* Неверов Владимир Николаевич — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- \* Волосников Дмитрий Владимирович — к.ф.-м.н., ИТФ УрО РАН
- \* Журавлёв Андрей Константинович — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- \* Каменский Иван Юрьевич — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- \* Таскаев Сергей Валерьевич — к.ф.-м.н., ЧелГУ
- \* Захарьевич Дмитрий Альбертович — к.ф.-м.н., ЧелГУ

## **Локальный комитет**

- \* Телегин Андрей Владимирович — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН (председатель)
- \* Агзамова Полина Александровна — УрГУ, ИФМ УрО РАН
- \* Арапов Александр Григорьевич — АСФ
- \* Горбачёв Игорь Игоревич — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН
- \* Гурашкин Александр Леонидович — к.ф.-м.н., ИТФ УрО РАН
- \* Меренцов Александр Ильич — УрГУ
- \* Небогатикова Надежда Александровна — НГУ
- \* Сташкова Людмила Алексеевна — ИФМ УрО РАН
- \* Шаропова Валентина Анатольевна — ИФМ УрО РАН
- \* Шкварин Алексей Сергеевич — ИФМ УрО РАН
- \* Шкварина Елена Геннадьевна — ИФМ УрО РАН

*Памяти академика Лумбунова Б.В.*



**Борис Васильевич Литвинов**

*(12.11.1929, г. Луганск, Украинская ССР – 23.04.2010, г. Снежинск Челябинской обл.)*



Академик Борис Васильевич Литвинов — выдающийся специалист в области атомной науки и техники, исследований физики взрыва и высоких плотностей энергии, один из создателей ядерных зарядов и ядерных взрывных устройств. Он — Герой социалистического труда, дважды награждён орденом В.И. Ленина, орденом Октябрьской Революции, орденом «За заслуги перед Отечеством» III и II степени, многими медалями, лауреат Ленинской премии, Демидовской премии, премии им. В.П. Макеева.

Борис Васильевич Литвинов в 1953 году окончил Московский механический институт по специальности «проектирование и эксплуатация физических приборов и установок» с квалификацией инженера-физика. С 1952 по 1961 год работал в КБ-11 (ныне РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Саров Нижегородской области) лаборантом, инженером, заместителем начальника исследовательского отделения. В 1961 году его назначили главным конструктором НИИ-1011 (ныне РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск Челябинской области). С 1997 года Б.В. Литвинов — заместитель научного руководителя РФЯЦ-ВНИИТФ им. академика Е.И. Забабахина.

Научные интересы Б.В. Литвинова связаны с исследованиями в целях создания ядерных зарядов различного назначения: для стратегических и тактических ядерных сил СССР и Российской Федерации, промышленных ядерных взрывов, физических опытов с использованием энергии ядерного взрыва. Эти заряды составляют основу ядерного арсенала России.

Одно из основных направлений исследований академика Б.В. Литвинова, его учеников и соратников — изучение свойств мощных взрывчатых веществ, а также детонационных и ударных волн, их формирования, способов управления этими волнами для создания взрывных устройств различной геометрии. К этому направлению тесно примыкают исследования процессов сжатия и изменения свойств конденсированных веществ при высоких и сверхвысоких давлениях. В последних работах, начиная с 90-х годов прошлого века, Б.В. Литвиновым и его сотрудниками было показано, что при таких давлениях в некоторых минералах происходит изменение химического и фазового составов.

Большое значение имеют исследования академика Литвинова, связанные с поведением делящихся материалов при различных условиях, с изучением технологических приёмов изготовления деталей и узлов из этих материалов. Благодаря этим работам были созданы высоконадежные конструкции ядерных зарядов.

Академик Литвинов был одним из инициаторов создания и применения ядерных взрывных устройств промышленного, невоенного назначения. При соблюдении всех необходимых международных процедур и под наблюдением МАГАТЭ эти устройства могут быть применены для выполнения физических опытов в качестве источника экологически чистого подземного ядерного взрыва.

Следуя традициям, заложенным академиками Ю.Б. Харитоном, Я.Б. Зельдовичем, Е.И. Забабахиним, Б.В. Литвинов уделял большое внимание обеспечению ядерной и взрывной безопасности. Это нашло отражение в его книгах, статьях и выступлениях. Он — участник Пагоушского движения.

Академик Б.В. Литвинов — автор трех монографий и соавтор 6 книг, автор и соавтор более 300 статей, докладов и научно-технических отчетов, имеет 11 авторских свидетельств на изобретения. Под руководством Б.В. Литвинова были проведены несколько ядерных взрывов в промышленных целях (тушение аварийных газонефтяных скважин, дробление и экскавация горных пород месторождений полезных ископаемых). Он принимал также участие в международных проектах по проблемам ядерного разоружения и ядерных испытаний.

*\* Информация взята с сайта Российского Федерального Ядерного Центра – Всероссийского научно-исследовательского института технической физики имени академика Е.И. Забабахина (РФЯЦ – ВНИИТФ) <http://www.vniitf.ru> с сайта УрО РАН, [http://www.uran.ru/sobitia/presid/ldf\\_2003/laureatlitvinov2003.htm](http://www.uran.ru/sobitia/presid/ldf_2003/laureatlitvinov2003.htm)*



---

## Содержание

<b>Вступительная статья</b>	<b>1</b>
<b>«Времена года», Литвинов Б.В.</b>	<b>4</b>
<b>Аналитический отчёт о Юбилейной X молодёжной школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества</b>	<b>6</b>
<b>ЛЕКЦИИ</b>	<b>9</b>
Графен: квантовые эффекты вплоть до комнатных температур, <i>Арапов Ю.Г.</i> . . . . .	11
Полупроводниковая спинтроника, <i>Аронзон Б.А.</i> . . . . .	12
О некоторых параметрах «глобального» потепления на территории бывшего Советского Союза, <i>Борисевич А.Н.</i> . . . . .	13
Магнетизм и функциональные свойства плёночных структур с аморфными ферромагнитными элементами, <i>Васьковский В.О.</i> . . . . .	14
Сверхпроводники на основе Nb <sub>3</sub> Sn: от исследования структуры к созданию промышленных проводов, <i>Деягина И.Л., Попова Е.Н., Романов Е.П.</i> . . . . .	15
Нанокерамика. Стоит ли овчинка выделки? <i>Кайгородов А.С.</i> . . . . .	16
Особенности магнитной микроструктуры аморфных и нанокристаллических ферромагнетиков, <i>Комогорцев С.В.</i> . . . . .	17
О теоретических задачах магнитной дефектоскопии, <i>Кудряшова О.В., Дякин В.В.</i> . . . . .	18
О диагностике метеоритов, <i>Логинов В.Н., Сергеева В.В.</i> . . . . .	19
Контурные тепловые трубы — высокоэффективные теплопередающие устройства для систем терморегулирования, <i>Майданик Ю.Ф.</i> . . . . .	21
Нейтронный дифрактометр Д76 на исследовательском реакторе ИВВ-2М (г.Заречный): способы сканирования обратного пространства монокристаллов и возможные пути модернизации установки, <i>Максимов В.И., Дубинин С.Ф.</i> . . . . .	22
Магнитные оксиды: фазовое расслоение и спиновая динамика по данным ЯМР, <i>Михалёв К.Н.</i> . . . . .	23
Инфракрасная спектроскопия магнитных полупроводников, <i>Мостовщикова Е.В.</i> . . . . .	24
Постоянные магниты: физика, технологии, применение, <i>Мушников Н.В.</i> . . . . .	25
Тёмная материя, тёмная энергия и другие проблемы современных космологических моделей, <i>Орлов И.О.</i> . . . . .	26

Сверхбыстрая магнитная динамика: эксперимент и теория, <i>Орлова Н.Б.</i> . . . . .	27
Ядерный магнитный резонанс как метод исследования вещества, <i>Пискунов Ю.В.</i> . . . . .	28
Магнитные измерения на СКВИДе, <i>Подгорных С.М.</i> . . . . .	29
Размерные эффекты на свойствах наноматериалов, <i>Ремпель А.А.</i> . . . . .	30
Электронная структура, сверхпроводимость и возможное псевдощелевое поведение в пниктидах железа, <i>Садовский М.В.</i> . . . . .	31
Флуктуации с 1/f спектром мощности, <i>Скоков В.Н.</i> . . . . .	32
Поддержка научной деятельности молодых учёных, <i>Телегин А.В.</i> . . . . .	33
<b>МАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ</b>	<b>35</b>
Исследование зарождения доменной структуры в пластине-(100) феррита-граната, <i>Бельский И.Е., Памятных Л.А., Шматов Г.А.</i> . . . . .	37
Однонаправленная обменная анизотропия в бислоях пермаллой-марганец, <i>Блинов И.В., Миляев М.А., Попов В.В.</i> . . . . .	38
Разработка системы магнитного смещения для плёночных магнитоимпедансных сенсо- ров, <i>Бучкевич А.А., Кулеш Н.А., Васьковский В.О.</i> . . . . .	39
Изменение электронной структуры и магнитного состояния в реальных кристалличе- ских структурах нептуния и кюрия под давлением, <i>Быструшкин В.Б., Дьяченко А.А., Лукоянов А.В., Шориков А.О., Циовкин Ю.Ю.</i> . . . . .	40
Особенности межкуристаллического обменного взаимодействия в наноструктурирован- ных сплавах РЗМ-3d-металл-бор и его связь с размерностью и фундаментальными магнитными константами фазовых составляющих, <i>Волегов А.С., Кудреватых Н.В., Андреев С.В., Сабирьянова Э.А., Незнахин Д.С., Маркин П.Е.</i> . . . . .	41
Возбуждение магнитоупругих колебаний в аморфном магнитострикционном ферро- магнетике с наведённой анизотропией, <i>Голыгин Е.А., Ярычева З.Л., Гаврилюк А.А., Петров А.Л.</i> . . . . .	42
Эффекты гранулированного состояния в магнитных мультислоях Co/SiO <sub>2</sub> , <i>Горьковенко А.Н., Лепаловский В.Н., Щёголева Н.Н., Васьковский В.О.</i> . . . . .	43
Изменение точки Кюри в ферритах ряда Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> –Mg <sub>2</sub> TiO <sub>4</sub> , <i>Губайдуллин Р.Р., Дубов И.Ю.</i> . . . . .	44
Учёт влияния несоизмеримых магнитных структур на статические и динамические свойства орторомбических манганитов в рамках оболочечной модели, <i>Давыдов А.Ю., Панов Ю.Д.</i> . . . . .	45
Формирование магнитного момента в α-Fe, <i>Ефремов А.В., Катанин А.А., Потеряев А.И., Шориков А.О., Скорняков С.Л., Коротин М.А., Анисимов В.И.</i> . . . . .	46
Эффект Фредерикса в планарных жидких кристаллах при специальных гранусловиях, <i>Еникеев Ю.А., Мигранов Н.Г.</i> . . . . .	47

Эффект подавления крипа магнитного потока в сверхпроводнике, помещённом вблизи ферромагнетика, <i>Захаров М.С.</i> . . . . .	48
Влияние прослойки Ti на магнитные и магниторезистивные свойства двухслойных плёнок $\text{Fe}_{19}\text{Ni}_{81}/\text{Tb-Co}$ , <i>Кулеш Н.А., Балымов К.Г., Васьковский В.О.</i> . . . . .	49
Влияние отжига слоя пермаллоя на магнитные и магниторезистивные свойства плёнок $\text{Fe}_{19}\text{Ni}_{81}/\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$ , <i>Маюра Н.С., Кулеш Н.А., Балымов К.Г., Васьковский В.О.</i> . . . . .	50
Магнитные свойства системы $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$ , <i>Меренцов А.И., Волегов А.С., Вешкурова К.А.</i> . . . . .	51
Магнитные свойства и структура нанокристаллического сплава $\text{Nd}_9\text{Fe}_{74}\text{B}_{12}\text{Ti}_4\text{C}$ , <i>Незнахин Д.С., Волегов А.С., Кудреватых Н.В., Андреев С.В.</i> . . . . .	52
Магнитные и магнитокалорические свойства $\text{La}_{0.7}\text{Ba}_x\text{Ca}_{0.3-x}\text{MnO}_3$ , <i>Павлухина О.О.</i> . . . . .	53
Спин-волновая динамика инварного сплава $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$ , <i>Пиядов В.В., Григорьев С.В., Витошнев В.В., Дядькин В.А., Мензель Д., Эккерлебе Х.</i> . . . . .	54
Корреляции ближнего магнитного порядка в соединениях $\text{R}_3\text{Ni}$ , <i>Прошкин А.В., Баранов Н.В., Губкин А.Ф., Герасимов Е.Г.</i> . . . . .	55
Моделирование магнитооптических изображений, создаваемых магнитными диполями в плёнках с плоскостной анизотропией, <i>Сабирьянова Э.А., Иванов В.Е.</i> . . . . .	56
Исследование влияния постоянного магнитного поля средней силы на водную кислотно-щелочную реакцию осаждения порошка магнетита, <i>Смирнов И.А., Журавский Д.В., Бриков Е.С.</i> . . . . .	57
Магнитоэлектрический эффект в нитевидных кристаллах азида серебра, <i>Удовиченко Е.В., Демко В.П.</i> . . . . .	58
Примесная модель магнитоэлектрических эффектов в $\text{LiVCuO}_4$ и $\text{LiCu}_2\text{O}_2$ , <i>Фёдорова Н.С.</i> . . . . .	59
Индукцированные давлением магнитные фазовые превращения в сплавах $\text{Fe}_{0.49}(\text{Rh}_{1-x}\text{Pd}_x)_{0.51}$ , <i>Чиркова А.М., Баранов Н.В., Волегов А.С., Степанова Е.А.</i> . . . . .	60
<b>ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ</b>	<b>61</b>
Исследование влияния направляющих вставок на интенсивность теплообмена при конденсации в плоскощелевом конденсаторе контурной тепловой трубы, <i>Бартули Э.Ф., Вершинин С.В., Майданик Ю.Ф.</i> . . . . .	63
Исследование кавитации леннард-джонсовской жидкости с помощью методов компьютерного моделирования, <i>Бобров К.С.</i> . . . . .	64
Изучение границы существования сверхпроводящей фазы в твёрдых растворах $\text{FeSe-FeTe}$ , <i>Вешкурова К.А., Меренцов А.И., Волегов А.С.</i> . . . . .	65
Влияние водорода на термический и механический гистерезисы в моно- и поликристаллах никелида титана, <i>Данильсон Ю.Н., Киреева И.В., Чумляков Ю.Н.</i> . . . . .	66
Структурные и динамические особенности коллоидного раствора вблизи золь-гель перехода, <i>Забегав С.О., Мокшин А.В.</i> . . . . .	67

---

Время жизни водородных связей при фазовом переходе «вода – аморфный лёд», <i>Зарипов Р.Р., Хуснутдинов Р.М.</i> . . . . .	68
Влияние термической обработки на циклическую стабильность сверхэластичности [123]-монокристаллов NiFeGaCo, <i>Казанцева Л.П., Тимофеева Е.Е.</i> . . . . .	69
Исследование структуры слоистого композита титановый сплав – орторомбический алюминид титана, <i>Коробов Ю.А., Латыпов М.Н.</i> . . . . .	70
Конкуренция зарядового упорядочения и сверхпроводящего параметра порядка в си- стемах со смешанной валентностью, <i>Королёв А.В.</i> . . . . .	71
Влияние числа вариантов дисперсных частиц на сверхэластичность в монокристаллах ферромагнитного сплава GoNiGa, <i>Крестинина И.В., Киреева И.В., Чумляков Ю.И.</i> . . . . .	72
Численное исследование влияния дальнедействующей корреляции дефектов структуры на неравновесную критическую релаксацию модели Гейзенберга, <i>Медведева М.А., Прудников П.В.</i> . . . . .	73
Корреляция фазовой картины и электрофизических свойств твёрдых растворов много- компонентной системы с участием сегнетоэлектриков-релаксоров, <i>Миллер А.И., Таланов М.В., Вербенко И.А.</i> . . . . .	74
Исследование электрических свойств полупроводников CdAs <sub>2</sub> и ZnAs <sub>2</sub> при высоких давлениях, <i>Тебеньков А.В., Мирзагалямов Р.Р., Бабушкин А.Н., Моллаев А.Ю.</i> . . . . .	75
Спектр комбинационного рассеяния, динамика решётки и фазовые переходы в альпа- солите Rb <sub>2</sub> KInF <sub>6</sub> , <i>Орешонков А.С., Втюрин А.Н., Крылов А.С., Крылова С.Н., Воронов В.Н.</i> . . . . .	76
Особенности изменения диссипативных и магнитных свойств феррита висмута, моди- фицированного ионами редкоземельных металлов, при концентрационных фазо- вых переходах, <i>Павелко А.А., Андрюшин К.П., Павленко А.В.</i> . . . . .	77
Магнитооптическое исследование спин-ориентационного фазового перехода первого рода, индуцированного магнитным полем, в ферроборате NdFe <sub>3</sub> (BO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> , <i>Пащенко М.И., Бедарев В.А., Безматерных Л.Н., Темеров В.Л.</i> . . . . .	78
Влияние высоких давлений на электрические свойства ионных проводников Cu <sub>1-x</sub> Ag <sub>x</sub> GeAsSe <sub>3</sub> (x = 0.55–0.75), <i>Пинигина К.С., Филиппов А.Л., Хейфец О.Л.</i> . . . . .	79
Численное исследование неравновесной критической динамики неупорядоченной мо- дели Изинга методом коротковременной динамики, <i>Поспелов Е.А., Прудников П.В.</i> . . . . .	80
Исследование кинетики вскипания перегретой жидкости и флуктуационных центров с помощью видеосъёмки, <i>Свитова К.В., Липнягов Е.В., Ермаков Г.В.</i> . . . . .	81
Влияние высокого давления на термоэлектрические свойства металлов (Pt, Fe, Pb, Ni, V), <i>Суханова Г.В., Суханов И.В.</i> . . . . .	82
Применение метода симуляции редких событий выборки переходных поверхностей с обменом путей (TIS-Swap) для изучения кристаллизации и кавитации переохла- ждённой жидкости, <i>Тетерин А.С.</i> . . . . .	83

---

Электропроводность и магнетосопротивление $\text{NH}_4\text{I}$ при высоких давлениях, <i>Тихомирова Г.В., Тебеньков А.В., Волкова Я.Ю.</i> . . . . .	84
Электропроводность и диэлектрическая проницаемость $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$ ( $x = 0.7, 0.75$ ), <i>Турутина Е.А., Хейфец О.Л.</i> . . . . .	85
Влияние температуры и давления на сопротивление ионного проводника $\text{AgGeAsS}_3$ , <i>Филиппов А.Л., Истомин А.И.</i> . . . . .	86
Электрические свойства $(\text{PbSe})_{0.8}(\text{AgAsSe}_2)_{0.2}$ при высоких давлениях и в магнитных полях, <i>Хейфец О.Л., Шакиров Э.Ф., Тебеньков А.В., Филиппов А.Л.</i> . . . . .	87
Исследование кинетики доменной структуры и процессов экранирования в монокристаллах ниобата лития и танталата лития при повышенных температурах, <i>Чезганов Д.С., Ахматханов А.Р., Батулин И.С., Шур В.Я.</i> . . . . .	88
Электрические свойства ионных проводников системы $\text{Ag-Sn-Sb-Se}$ при высоких давлениях, <i>Шакиров Э.Ф.</i> . . . . .	89
Влияние температуры охлаждения конденсатора на рабочие характеристики медь-водяной контурной тепловой трубы, <i>Юшакова С.И., Вершинин С.В., Майданик Ю.Ф.</i> . . . . .	90
<b>ПРОВОДИМОСТЬ И ТРАНСПОРТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ</b>	<b>91</b>
Электропроводность сложных оксидов $\text{VI}(\text{CR,FE})\text{VOX}$ с различными соотношениями $\text{Cr:Fe}$ , <i>Величко Е.В., Буянова Е.С., Морозова М.В., Петрова С.А.</i> . . . . .	93
Электрические свойства сплавов $\text{Ni}_3\text{Mn}_x\text{Al}_{1-x}$ , <i>Волкова Н.В., Коуров Н.И., Марченков В.В., Weber H. W.</i> . . . . .	94
Роль примеси в формировании значения остаточного электросопротивления разбавленных сплавов переходных металлов на основе ферромагнетиков, <i>Гапонцев В.В., Циовкин Ю.Ю.</i> . . . . .	95
Слабо некогерентный предел межслоевой проводимости в магнитном поле, <i>Григорьев П.Д.</i> . . . . .	96
Температурные зависимости электрических свойств стеклообразного $(\text{GeSe})_{0.05}(\text{CuAsSe}_2)_{0.95}$ , <i>Курочка К.В., Мельникова Н.В.</i> . . . . .	97
Осцилляции Шубникова де Газа в гетероструктуре $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As/GaAs}$ , <i>Гудина С.В., Клепикова А.С., Неверов В.Н.</i> . . . . .	98
О механизме проводимости в композитах ПСКК/KDP, <i>Неустроев А.С., Семёнова М.И.</i> . . . . .	99
Нанокристаллизация в тонких аморфных плёнках $\text{Si-M}$ ( $\text{M}=\text{Cr, Mn}$ ), <i>Новиков С.В., Бурков А.Т., Шуманн И.</i> . . . . .	100
Структура профиля потенциала и характер распределения носителей заряда в транзисторных гетероструктурах с двумерными транспортными каналами, <i>Орлов М.Л., Орлов Л.К.</i> . . . . .	101
Модель Эмери в DMFT+ $\Sigma_k$ подходе, <i>Павлов Н.С., Некрасов И.А.</i> . . . . .	102
Эффект Холла в электронном сверхпроводнике $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ с разной степенью беспорядка, <i>Петухов Д.С., Чарикова Т.Б., Шелушинина Н.Г., Харус Г.И., Неверов В.В., Петухова О.Е., Иванов А.А.</i> . . . . .	103

Симметрия спаривания в электронном сверхпроводнике $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ , <i>Петухова О.Е., Чарикова Т.Б., Шелушинина Н.Г., Петухов Д.С., Иванов А.А.</i> . . . . .	104
Влияние низких температур и высоких давлений на электрические свойства новых перовскитоподобных фаз $\text{CaM}\text{Cu}_2\text{V}_4\text{O}_{12}$ ( $M=\text{Co}, \text{Fe}$ ), <i>Устинова И.С., Мельникова Н.В., Кадырова Н.И., Зайнулин Ю.Г.</i> . . . . .	105
<b>ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ</b>	<b>107</b>
Применение многофакторного эксперимента для определения оптимального состава, <i>Карзанова М.В., Калинина Ю.И., Чигиринский Ю.И.</i> . . . . .	109
Расчёт параметров генерации второй гармоники в нелинейно-оптических кристаллах с периодической доменной структурой, <i>Карпов Д.А., Батулин И.С., Шур В.Я.</i> . . . . .	110
Ab-initio исследование электронной структуры фторида кальция, <i>Козин Р.В., Слепухин Г.С., Никифоров А.Е., Чернышев В.А.</i> . . . . .	111
Физические свойства оптических приборов на основе структурированных жидких кри- сталлов, <i>Кондратьев Д.В., Мигранов Н.Г.</i> . . . . .	112
Исследование электронного строения твёрдых растворов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ методами рент- геновской и рентгеноэлектронной спектроскопии, <i>Коротаев Е.В., Федоренко А.Д., Лаврухина С.А., Семушкина Г.И., Михеев А.В.</i> . . . . .	113
Описание искажений кристаллической решётки $\text{BaBiO}_3$ в рамках метода LDA+U в ба- зисе функций Ванье, <i>Коротин Дм.М., Куколев В.И., Анисимов В.И.</i> . . . . .	114
Формирование самоорганизованных нанодоменных структур в результате импульсного лазерного облучения в монокристаллах ниобата лития, <i>Мингалиев Е.А., Шур В.Я., Кузнецов Д.К., Лобов А.И., Незащев С.А., Румянцев Е.Л.</i> . . . . .	115
Новый метод определения концентрационного профиля элементов по данным рентге- новской рефлектометрии в условиях аномального рассеяния рентгеновских лучей, <i>Саламатов Ю.А., Бабанов Ю.А.</i> . . . . .	116
Рентгеноспектральное и рентгеноэлектронное изучение особенностей электронной структуры комплексов фталоцианинов переходных металлов, <i>Семушкина Г.И., Пляшкевич В.А., Гуляев Р.В.</i> . . . . .	117
Параметры термолюминесценции в $\beta$ -облучённых монокристаллах AlN, <i>Спиридонов Д.М., Белоусова Е.Ю., Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А.</i> . . . . .	118
Сольватация аниона в диполярном апротонном растворителе, <i>Эркабаев А.М., Бушкова О.В., Попов С.Э.</i> . . . . .	119
<b>РЕЗОНАНСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ</b>	<b>121</b>
Магнитные свойства системы $\text{RTiO}_3$ , <i>Агзамова П.А., Никифоров А.Е.</i> . . . . .	123
$^{17}\text{O}$ ЯМР исследование сверхпроводящих оксидов $\text{BaPb}_{1-x}(\text{Bi},\text{Sb})_x\text{O}_3$ , <i>Арапова И.Ю., Пискунов Ю.В., Оглобличев В.В., Садыков А.Ф., Геращенко А.П., Бузлуков А.Л., Верховский С.В.</i> . . . . .	124
Особенности орбитального упорядочения в $\text{LaMnO}_3$ по данным ядерного магнитного резонанса $^{139}\text{La}$ , <i>Волкова З.Н., Михалёв К.Н., Верховский С.В., Геращенко А.П.</i> . . . . .	125
Инверсный магнитоэлектрический эффект в феррит-пьезоэлектрическом диске, <i>Филиппов Д.А., Галкина Т.А.</i> . . . . .	126



Исследование коэффициента пропускания электромагнитного кристалла, <i>Зотов И.С.</i> . . . . .	127
Особенности фазового расслоения в $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$ по данным ЯМР, <i>Лекомцев С.А., Михалёв К.Н., Волкова З.Н., Архипов В.Е., Королёв А.В., Муковский Я.М.</i> . . . . .	128
Исследование магнитной структуры мультиферроика $\text{LiCu}_2\text{O}_2$ методами ядерного маг- нитного резонанса, <i>Садыхов А.Ф., Пискунов Ю.В., Геращенко А.П., Оглобличев В.В., Бузлуков А.Л., Михалёв К.Н., Верховский С.В.</i> . . . . .	129
$^{51}\text{V}$ ЯМР исследование градиента электрического поля в парамагнитной фазе соедине- ний $\text{M}_3\text{V}_2\text{O}_8$ ( $\text{M}=\text{Co}, \text{Ni}$ ), <i>Смольников А.Г., Оглобличев В.В.</i> . . . . .	130
Магниторезонансные исследования структурного фазового перехода в монокристалле $\text{LaGa}_{0.995}\text{Mn}_{0.005}\text{O}_3$ , <i>Фокин А.В.</i> . . . . .	131
<b>ФИЗИКА НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР</b>	<b>133</b>
Анизотропия магнитосопротивления в гексабориде неодима $\text{NdB}_6$ , <i>Анисимов М.А., Глушков В.В., Богач А.В., Демидов С.В., Самарин Н.А., Филипов В.Б., Шицевалова Н.Ю., Случанко Н.Е.</i> . . . . .	135
Аномалии магнитосопротивления $\text{GdV}_6$ , <i>Анисимов М.А., Глушков В.В., Богач А.В., Демидов С.В., Самарин Н.А., Филипов В.Б., Шицевалова Н.Ю., Случанко Н.Е.</i> . . . . .	136
Исследование нового типа возбуждений на поверхности квантовых жидкостей, <i>Григорьев А.Д., Григорьев П.Д., Дюгаев А.М.</i> . . . . .	137
Автоколебания и замораживание тока, протекающего по сверхпроводящему кольцу, <i>Коверя В.П., Бондаренко С.И., Кривсун А.В., Левченко Н.М.</i> . . . . .	138
Влияние затухания фононных состояний на анизотропию поглощения продольного ультразвука в кубических кристаллах, <i>Кулеев И.Г., Кулеев И.И.</i> . . . . .	139
<b>СТРУКТУРНЫЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ ТЕЛ</b>	<b>141</b>
Особенности структуры композитов $\text{V}_i\text{Pb-2223/Ag}$ , отожжённых в атмосфере $\text{N}_2:\text{O}_2$ , <i>Криницина Т.П., Кузнецова Е.И., Блинова Ю.В., Сударева С.В., Раков Д.Н., Белотелова Ю.Н.</i> . . . . .	143
Исследования процесса зарождения коррозионно-усталостных трещин в малоуглеро- дистых строительных сталях, <i>Бутусова Е.Н., Котков Д.Н., Нохрин А.В., Чувильдеев В.Н.</i> . . . . .	144
Влияние легирующих добавок на структурные особенности и механические свойства высоко прочных магнитных сплавов на основе $\text{Fe} - \text{Cr} - \text{Co}$ , <i>Вершинин А.В.</i> . . . . .	145
Электронно-микроскопическое наблюдение вытягивания дислокации вдоль выделен- ного направления в интерметаллиде $\text{Ni}_3\text{Ge}$ , <i>Власова А.М., Гринберг Б.А., Иванов М.А., Антонова О.В., Плотников А.В., Кругликов Н.А., Соловьёва Ю.В.</i> . . . . .	146
Внутреннее строение кристаллов $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12} + \text{Nd}^{3+}$ , полученных методами Чохральско- го и направленной кристаллизации, <i>Брызгалов А.Н., Волков П.В.</i> . . . . .	147

Симметричные особенности кристаллов семейства титанил-фосфата калия, <i>Гажулина А.П., Марычев М.О.</i> . . . . .	148
Структура и свойства атомно-упорядочивающихся сплавов $\text{Cu}_3\text{Pd}$ и $\text{Cu}_3\text{Au}$ после интенсивной пластической деформации кручением и отжига, <i>Гохфельд Н.В., Буйнова Л.Н., Пушин В.Г.</i> . . . . .	149
Дилатометрическое изучение обратного мартенситного превращения в стали 12Х18Н10Т, деформированной при отрицательных температурах, <i>Максимкин О.П., Демидова Д.А., Рубан С.В., Гусев М.Н.</i> . . . . .	150
Причины высокой упругости одновременно с пластичностью в человеческом дентине, <i>Зайцев Д.В., Бузова Е.В., Панфилов П.Е.</i> . . . . .	151
Морфология Nb волокон и диффузионных слоёв $\text{Nb}_3\text{Sn}$ в многоволоконных композитах Nb/Cu–Sn, легированных титаном, <i>Попова Е.Н., Дерягина И.Л., Захаревская Е.Г.</i> . . . . .	152
К вопросу о расплавлении, вихреобразовании и фрагментации при сварке взрывом, <i>Иноземцев А.В., Гринберг Б.А., Иванов М.А., Рыбин В.В., Пацелов А.М., Елкина О.А., Антонова О.В.</i> . . . . .	153
Зернограничная диффузия в наноструктурных материалах при относительно больших временах отжига, <i>Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Ломаев И.Л.</i> . . . . .	154
Микроструктура и механические свойства сильнодеформированного магния, <i>Круликов Н.А., Каменецкий Б.И., Волков А.Ю., Саврай Р.В.</i> . . . . .	155
Исследование закономерностей локализации деформации при динамическом нагружении образцов из сплава А6061, <i>Ляпунова Е.А., Соковилов М.А., Чудинов В.В., Уваров С.В., Наймарк О.Б.</i> . . . . .	156
Радиационно-индуцированные, структурно-фазовые превращения в сплавах Fe-Ni-Al с различной микроструктурой, <i>Ляшков К.А., Данилов С.Е.</i> . . . . .	157
Рентгеновский фазовый анализ нанокристаллического порошка $\text{HfO}_2$ с использованием метода полнопрофильного анализа Ритвельда, <i>Маканов С.В., Денисова О.В., Чукин А.В.</i> . . . . .	158
Структурное состояние объёмных кристаллов разбавленных магнитных полупроводников $\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}$ и $\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Se}$ ( $x = 0.01$ ), <i>Максимов В.И., Дубинин С.Ф., Пархоменко В.Д., Суркова Т.П.</i> . . . . .	159
Структура и свойства замещённого ванадием хромата висмута, содержащего колончатую структуру $[\text{Bi}_{12}\text{O}_{14}]_n^{8n+}$ , <i>Михайловская З.А., Петрова С.А., Буянова Е.С.</i> . . . . .	160
Обобщённый закон распределения графита и его связь с физико-механическими свойствами чугуна, <i>Мухаметшина И.Ю., Белых В.В.</i> . . . . .	161
Автоблокировка дислокаций в интерметаллиде $\text{Ni}_3\text{Ge}$ при кубическом скольжении: экспериментальные данные, <i>Плотников А.В., Гринберг Б.А., Иванов М.А., Антонова О.В., Круликов Н.А., Соловьёва Ю.В., Власова А.М.</i> . . . . .	162
Исследование дефектной структуры ферритно-перлитной стали 05Г2МФБ после интенсивной пластической деформации кручением под давлением, <i>Попова С.А., Литовченко И.Ю.</i> . . . . .	163
Фазовый состав электровзрывных электротехнических титан-бор-медных поверхностных слоёв, <i>Романов Д.А., Будовских Е.А., Громов В.Е.</i> . . . . .	164

Новые результаты изучения мартенситного $\gamma \rightarrow \alpha'$ превращения в стали 12X18H10T, необлучённой и облучённой нейтронами, деформированной в диапазоне температур от $-100$ до $+20^\circ\text{C}$ , <i>Максимкин О.П., Мережко М.С., Рубан С.В., Рыбин С.В.</i> . . . . .	165
Первопринципное моделирование влияния примесей Pd на энергию образования вакансии в ОЦК-железе, <i>Рузанова Г.Е., Мирзоев А.А.</i> . . . . .	166
Формирование промежуточной фазы при фазовых превращениях в упорядоченном наноструктурированном сплаве FePd, <i>Сташкова Л.А., Гавико В.С., Власова Н.И., Попов А.Г., Гундеров Д.В., Савадж К.</i> . . .	167
О возможности получения нанокристаллической структуры в ниобии методом кручения под высоким давлением при криогенных температурах, <i>Столбовский А.В., Попов В.В., Попова Е.Н., Пилюгин В.П.</i> . . . . .	168
Структура монокристалла $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_{3+\delta}$ , выращенного методом бестигельной зонной плавки, <i>Телегин С.В., Елохина Л.В., Костромитина Н.В., Наумов С.В.</i> . . . . .	169
IN SITU барическая и деформационная зависимости сопротивления сдвигу ГЦК (Cu, Ag, Au, Fe-Ni) металлов, <i>Толмачёв Т.П., Брытков Д.А., Пилюгин В.П.</i> . . . . .	170
Моделирование взаимодействия водорода с вакансией ОЦК-железа, <i>Урсаева А.В., Мирзоев А.А.</i> . . . . .	171
Влияние дополнительной термообработки на текстуру и размеры областей когерентного рассеивания углеродных волокон, <i>Фёдоров С.И.</i> . . . . .	172
Исследование структуры поверхности скола монокристалла висмута с помощью атомно-силовой микроскопии, <i>Хрипунов Ю.В.</i> . . . . .	173
Высокопрочные коррозионностойкие алюминийсодержащие стали для упругих элементов, <i>Мальцева Л.А., Озерец Н.Н., Шаранова В.А., Левина А.В.</i> . . . . .	174
Экспериментальное моделирование процессов интенсивной пластической деформации, <i>Ярославцев А.А., Толмачев Т.П., Брытков Д.А., Пилюгин В.П.</i> . . . . .	175
<b>НЕРАЗРУШАЮЩИЙ КОНТРОЛЬ</b>	<b>177</b>
Автоматизированная система неразрушающего анализа фотоэлектрических характеристик кристаллов методом экситонной спектроскопии, <i>Кормильцев И.В.</i> . . . . .	179
ЭМА сканер-дефектоскоп для ферромагнитных материалов, <i>Михайлов А.В., Гобов Ю.Л., Смородинский Я.Г.</i> . . . . .	180
Измерение удельного электрического сопротивления приставными малогабаритными приборами, <i>Корх М.К., Огнева М.С.</i> . . . . .	181
Мобильная программно-аппаратная система неразрушающего контроля механических свойств стальных изделий, <i>Сташков А.Н., Корх М.К., Ефремов А.В.</i> . . . . .	182
<b>ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ</b>	<b>183</b>
Поверхностное натяжение раствора этан-азот, <i>Анбаева В.Н., Хотиенкова М.Н.</i> . . . . .	185

---

Экспериментальная установка для исследования фазовых равновесий и поверхностного натяжения в растворах: циркуляционный насос, <i>Арефин С.В.</i> . . . . .	186
Определение критических параметров веществ с помощью искусственных нейронных сетей, <i>Богатищева Н.С.</i> . . . . .	187
Динамические характеристики струй перегретой воды, <i>Бусов К.А., Решетников А.В., Мажейко Н.А.</i> . . . . .	188
Сопоставление теплофизических характеристик жидкостей в режиме реального времени, <i>Волосников Д.В., Смотрицкий А.А., Старостин А.А.</i> . . . . .	189
Измерение температуропроводности шарообразных и цилиндрических образцов импульсным методом, <i>Каракулов О.Е., Загребин Л.Д.</i> . . . . .	190
Теплофизические свойства функциональных материалов на основе ниобатов щелочных металлов и цирконата-титаната свинца, <i>Омаров З.М., Абдуллаев Х.Х., Кравченко О.Ю., Андрюшин К.П., Андрюшина И.Н.</i> . . . . .	191
Характеристики излучения продуктов сгорания промышленных и энергетических установок, <i>Кутергина Н.А.</i> . . . . .	192
Теплопроводность нанокompозита железа $\alpha\text{-Fe} + \text{Am}(\text{Fe} - \text{C})$ , <i>Мухаметшина И.Ю., Ульянов А.Л., Загребин Л.Д.</i> . . . . .	193
Математическое моделирование и исследование конвекции жидкости в высокочастотном электромагнитном поле, <i>Нагаев Ф.А., Фатыхов М.А.</i> . . . . .	194
Экспериментальная установка для исследования фазового разделения в расслаивающихся растворах, <i>Петров С.И., Гильдин Е.Ю.</i> . . . . .	195
Разработка устройства бесконтактного экспресс-контроля химических превращений в промышленном синтезе, <i>Волосников Д.В., Смотрицкий А.А.</i> . . . . .	196
Использование формализма среднего времени первого перехода при изучении кристаллизации переохлажденной жидкости, <i>Тинеев А.О., Тетерин А.С.</i> . . . . .	197
Фазовое расслоение в системе этан–азот, <i>Хотиенкова М.Н., Петров С.И., Андбаева В.Н.</i> . . . . .	198

**ЭЛЕКТРОФИЗИКА** **199**

Моделирование электрической прочности промежутка в SF <sub>6</sub> в условиях интенсивного движения среды, <i>Глушков Д.А., Черных И.В.</i> . . . . .	201
Электрофизические свойства композиционного материала TiB <sub>2</sub> /Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> на корундовом огнеупорном вяжущем, <i>Добросмыслов С.С., Резинкина О.А., Черноусов А.А.</i> . . . . .	202
Магнитно-импульсное прессование — эффективный способ получения объёмных материалов широкого спектра применений, <i>Заяц С.В.</i> . . . . .	203

---

---

Распространение длинных нелинейных волн по плоским струям диэлектрической жидкости в тангенциальном электрическом поле, <i>Зубарев Н.М., Зубарева О.В.</i> . . . . .	204
Равновесные конфигурации поверхности капли проводящей жидкости на плоском электроде в локально неоднородном электрическом поле, <i>Зубарева О.В., Зубарев Н.М.</i> . . . . .	205
Нелинейная динамика поверхности раздела диэлектрических жидкостей в вертикальном электрическом поле, <i>Зубарев Н.М., Кочурин Е.А.</i> . . . . .	206
Малогобаритный электронный ускоритель для радиационных тестов, <i>Реутова А.Г., Шунайлов С.А., Шпак В.Г., Яландин М.И.</i> . . . . .	207
Влияние ионной бомбардировки на структуру поверхности автоэмиссионного катода, <i>Кузнецов В.Л., Терентьева В.А., Скоморохов Д.С., Кислов Е.А., Чепусов А.С., Комарский А.А.</i> . . . . .	208
<b>НАНОМАТЕРИАЛЫ</b>	<b>209</b>
Теоретическое исследование зависимости между деформацией графеновых слоёв и миграцией вакансий, <i>Ананьева Ю.Е.</i> . . . . .	211
Наноструктуры графена в модели Хаббарда, <i>Волков Д.С., Миронов Г.И.</i> . . . . .	212
Математическое моделирование термодинамических свойств магнитных нанодисперсных коллоидов: определение пятого вириального коэффициента в разложении свободной энергии магнитных жидкостей, <i>Епифанов Ю.А.</i> . . . . .	213
Термодинамические свойства нанокластеров платины, <i>Замулин И.С.</i> . . . . .	214
Гигантский магнорезистивный эффект в системах CoFe/Cu, <i>Киселёва М.С., Мияев М.А., Наумова Л.И., Проглядо В.В., Банникова Н.С.</i> . . . . .	215
Межчастичные корреляции в нанодисперсных магнитных жидкостях: учёт полидисперсности, <i>Крутикова Е.В., Елфимова Е.А.</i> . . . . .	216
Влияние внешнего магнитного поля на парные корреляции в магнитных наножидкостях, <i>Кузнецов А.С., Елфимова Е.А.</i> . . . . .	217
Пьезорезистивный эффект в углеродных нанотрубках и графеновых лентах, <i>Ляпкосова О.С., Лебедев Н.Г.</i> . . . . .	218
Электронномикроскопическое исследование трансротационных наноструктур, <i>Мальшева А.В., Колосов В.Ю., Елисева Н.Ю.</i> . . . . .	219
Влияние размеров кристаллитов на электрические свойства диоксида циркония при высоких давлениях, <i>Мальцева Е.Г., Бабушкин А.Н.</i> . . . . .	220
Влияние одноосного растяжения плёнок поливинилиденфторида на ширину и частотное положение СН-пигов в ИК-спектрах, <i>Морилова В.М., Корякова О.В., Евсюков С.Е., Песин Л.А.</i> . . . . .	221
Теоретическое исследование геометрической и электронной структуры кристаллического и аморфного кремния с различным содержанием лития, <i>Попов З.И., Фёдоров А.С.</i> . . . . .	222

---

---

Зондовая мёссбауэровская спектроскопия границ зёрен нанокристаллической системы Mo – O, полученной механическим сплавлением, <i>Протасов А.В., Елсуков Е.П.</i> . . . . .	223
Влияние отжига на магниторезистивные свойства сверхрешёток CoFe/Cu, <i>Рябова Т.А., Миляев М.А., Наумова Л.И., Проглядо В.В., Каменский И.Ю.</i> . . . . .	224
Структура тетраядерного кластера Mn <sub>4</sub> в мономолекулярных наномангнетиках, <i>Семеняк Д.Н., Стариченко Д.В., Швачко Ю.Н.</i> . . . . .	225
Определение скорости звука в магнитной жидкости на основе акустомагнитного эффекта, <i>Стороженко А.М.</i> . . . . .	226
Зависимость коэффициента диффузии электронов углеродных зигзагообразных нанотрубок от электрического поля, <i>Судоргин С.А., Лебедев Н.Г., Белоненко М.Б.</i> . . . . .	227
Магнитные свойства концентрированных нанодисперсных магнитных коллоидов, <i>Елфимова Е.А., Ефимова В.А., Иванов А.О., Кэмп Ф., Турьшева Е.В.</i> . . . . .	228
Одностенная золотая нанотрубка (5,3) в модели Хаббарда, <i>Филиппова Е.Р., Миронов Г.И.</i> . . . . .	229
Роль термического воздействия на организацию синтезированных из газовой фазы нанокластеров меди, <i>Чепкасов И.В.</i> . . . . .	230
Оптические измерения кинетико-прочностных параметров магнитожидкостной мембраны, <i>Шабанова И.А.</i> . . . . .	231
Электронное строение углеродных нанотрубок в растворе бензола, <i>Шамина Е.Н., Лебедев Н.Г.</i> . . . . .	232
Моделирование структуры карбиновых нанотрубок и карбинофуллеренов, <i>Шахова И.В.</i> . . . . .	233
<b>БИОФИЗИКА</b>	<b>235</b>
Квантово-химическое исследование процесса формирования целентеразина и его изомерных форм, <i>Антипина Л.Ю., Томилин Ф.Н., Овчинников С.Г.</i> . . . . .	237
Численное исследование нелинейных уединённых волн в спиральной модели молекулярных цепочек ДНК, <i>Хамзин С.Р., Закирьянов Ф.К.</i> . . . . .	238
Fe@C наноконпозиты и возможности их терапевтического применения, <i>Шарапова В.А., Бызов И.В., Тюменцева Н.В., Мысик А.А., Уймин М.А., Юшков Б.Г., Ермаков А.Е.</i> . . . . .	239
<b>Авторский указатель</b>	<b>240</b>

---

## Вступительная статья

*«Цвет нации великой и бесстрашной,  
что среди племён неведомых и странных  
могучую державу основала. . .»  
Камознс «Лузиады»*

«Вот и настало время писать вступительную статью» — как приятно это написать.

XI Всероссийская молодёжная школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-11) посвящена памяти академика Бориса Васильевича Литвинова. В этой статье я постараюсь отразить, как возникла эта идея, что связывает Бориса Васильевича со школой-семинаром, рассказать о его личности. После вступительной статьи и нескольких рассказов из книги Б.В. Литвинова приводится аналитический отчёт о прошедшей в 2009 г. СПФКС-10.

В конце апреля 2010 г. в Волгограде проходила Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых (ВНК-СФ). Эта конференция во многом родственна СПФКС, и даже часть оргкомитета нашей школы являются членами оргкомитета ВНК-СФ. На торжественном закрытии конференции был показан фильм о СПФКС, представляющий собой слайд-шоу из фотографий, связанных с предыдущей школой-семинаром. Среди фотографий были и фото с Борисом Васильевичем Литвиновым, который был приглашённым докладчиком на СПФКС-8 и 9. После демонстрации фильма Михаил Виссарионович Садовский, академик РАН, который только что приехал из Екатеринбурга, мне тихонько сказал: «Вы тут фильм с Борисом Васильевичем показываете, а он пять дней назад умер». Так мы узнали эту печальную весть.

Летом, во время собрания оргкомитета, стихийно возникла и мгновенно была всеми поддержана идея, посвятить СПФКС-11 памяти академика РАН Б.В. Литвинова. Писать о людях такого уровня, я считаю, имеют право три категории лиц: 1) журналисты-биографы, специально занимающиеся изучением жизни этого человека, 2) те, чей жизненный опыт позволял по достоинству оценить масштаб личности

этого человека, 3) люди, которые его помнят, с которыми он общался. К первым двум категориям я себя не отношу, поэтому в этой статье, попытаюсь рассказать о том, каким я запомнил Бориса Васильевича, и донести до тех, кто не был с ним лично знаком, те грани его личности, о которых редко пишут в официальных биографиях.

Перед глазами стоит пожилой, энергичный человек с кустистыми бровями и ясными, мудрыми глазами. Видный учёный и высокопоставленный руководитель (академик РАН, главный конструктор, лауреат Ленинской премии, Герой социалистического труда) и в тоже время необычайно скромный человек, внимательный к людям и требовательный к себе. Моя тётя Алевтина Андреевна Старостина, хорошо знающая его больше 30 лет, сказала о нём так: «Он — настоящий Академик». Этим она пыталась передать, что в Б.В. Литвинове гармонично сочетается всё то, что народ вкладывает в понятие Академик. В книге заместителя научного руководителя РФЯЦ – ВНИИТФ В.А. Симоненко, посвящённой 80-летию со дня рождения Б.В. Литвинова, говорится: «В течение всей своей жизни на Урале, в Снежинске Борис Васильевич оказывает большое влияние не только на деятельность конструкторского бюро, которое он возглавлял, но и всех подразделений, с ним связанных, на развитие всего института. Он занимает активную позицию в деятельности Уральского отделения РАН, в общественной жизни города и области. . . Характерно, что при таком напряжённом ритме жизни он трогательно внимателен к детям, отыскивает время для встреч со школьниками, студентами. В них он всегда находит внимательных слушателей. Нет сомнений, что уроки академика и мудрого наставника идут им на пользу».

Почему этот Человек общался с нами, ездил на школу, тратил свое время и силы на нас? Мо-

жет быть потому, что СПФКС — это школа и как «настоящий Академик» Борис Васильевич хотел донести и передать молодым учёным частичку своего опыта и своей мудрости? А может быть и потому (по крайней мере, я тешу себя такой надеждой), что ему было интересно и хорошо на школе-семинаре, что общение с молодыми, энергичными и талантливыми ребятами подпитывало и его? Для этих надежд есть основания. Так, сам Борис Васильевич, уезжая с СПФКС-9, сказал, что подготовка к докладу подвинула его к идее написать книгу. Есть и другое подтверждение. Когда мы обратились к его супруге с нашей идеей посвятить СПФКС-11 памяти академика Б.В. Литвинова, Алла Ивановна сказала, что Борису Васильевичу очень нравилось ездить к нам на школу, и он очень хорошо и тепло отзывался о молодых ребятах со школы и об Институте физики металлов. Радение душой о будущем, позиции наставника, учителя были близки Борису Васильевичу. Так в своей книге «Времена года» в новелле «Первое сентября» Борис Васильевич рассказывает: «Я ... стою возле ... 127-ой школы, приглашённый её директором сказать школьникам приветственные слова по случаю первого сентября и начала занятий... Благие пожелания, высказанные директором школы и представителями общественности, в числе которых и я, как бы красиво и весомо они не были высказаны, вряд ли запомнятся школьниками, особенно, первокурсниками. Чем дольше торжественная часть первого сентября, тем утомительнее она и тем хуже усваивается красноречие взрослых тётей и дядей. Первое сентября звучит как последний аккорд длинной симфонии летних каникул, за которыми последуют учебные ежедневные будни, когда интересные, когда нудные, но с обязательным ежедневным трудом учёбы. Человек в школе усваивает разные знания, в том числе и умение трудиться. Это знание едва ли не самое главное в жизни. Научись в школе работать и преодолевать трудности, проще будет и в дальнейшей жизни, потому что только умеющий работать без труда находит себе место в жизни. Школа — она во всех смыслах школа. Хвала и честь ей!»

В моих детских воспоминаниях сохранилась подобная встреча. Когда я был в седьмом

классе, в Доме пионеров собрали ребят, которые заинтересовались работой новообразованного школьного научного общества. С напутственным словом выступил и Б.В. Литвинов. Я уже не помню, о чем говорили другие выступающие, и как называлось это «научное общество». Но помню, что именно выступление главного конструктора «атомной бомбы», как шептались между собой мальчишки, произвело на меня впечатление. Если постараться, я бы смог даже по прошествии лет передать информационную и эмоциональную составляющие его речи. В старших классах я ещё несколько раз присутствовал на выступлениях Бориса Васильевича.

Следующая встреча произошла уже в конце 90-х годов. Он, выглядел таким, каким я запомнил его в детстве. В моем представлении он нисколько не изменился и за следующие десять лет. Мною он воспринимался как что-то вечное и постоянное. Помню, как на школе физиков-теоретиков «Коуровка-98» этот умный и сильный человек с дрожью в голосе рассказывал о бедственном положении в снежинском ядерном центре.

В постперестроечные годы началось научное сотрудничество Бориса Васильевича с Институтом физики металлов УрО РАН. В Снежинске многоточечным синхронным подрывом зарядов взрывчатого вещества получали сферическую, сходящуюся в центр сферы ударную волну. Помещённое в центр этой сферы исследуемое вещество сжималось давлениями, не достижимыми другими методами. На основе полученных экспериментальных данных, исследовались и описывались совместно с ИФМ происходящие при таких взрывах процессы.

После седьмой СПФКС, встретив Б.В. Литвинова в ИФМ, я позвал его на школу-семинар с приглашённым докладом. Откликнулся он на удивление легко. Помню, что во время прохождения СПФКС-8 ударили морозы и в зале, где проходили заседания, было очень холодно. Все сидели в накинутых на плечи пуховиках и шубах. Борис Васильевич наотрез отказался поступать подобным образом, и пол дня, которые провел у нас, упорно сидел без куртки. Не смотря на спартанские условия, чувствовалось, что Борису Васильевичу понравилась школа-семинар, общение с молодыми учёны-



ми. Его доклад «Как я участвовал в создании атомных бомб» вызвал огромный интерес слушателей. Следующим летом, отвечая на приглашение участвовать в СПФКС-9, он отказывался, говоря, что рад бы, но ему нечего нам рассказать. Это ему — академику, человеку с активной жизненной позицией, внёсшему огромный вклад в создание ядерного щита нашей Родины и прожившему яркую и насыщенную жизнь! С такой, на первый взгляд, удивительной ситуацией нам уже приходилось сталкиваться, когда маститые учёные, сделав доклад, на следующий год говорят, что им нечего рассказать. На самом деле это происходит из-за того, что лектора не представляют, что будет интересно и полезно для участников школы-семинара. Когда обрисовываешь, что бы мы хотели услышать, у лекторов появляются новые идеи для лекций. Так было и в этот раз. Борис Васильевич, воодушевившись предложенной темой, сходу, в течение следующих 1.5 часов, рассказывал мне о своем будущем докладе. Его доклад «Использование ядерных взрывов в мирных целях» на СПФКС-9 прошёл на ура. После выступления, в свободной беседе, он сказал, что, по крайней мере, ещё на пару лекций у него материал уже есть. Когда его провожали к машине, идущие рядом с ним люди невольно ощутили себя звёздами

на подиуме. Со всех сторон подбегали участники школы и фотографировали, фотографировали, фотографировали. Спасибо им за это. Казалось бы, эти фотографии разделяют лишь мгновения, но Борис Васильевич на них разный — улыбается, смеётся, заинтересованно слушает, хмурится, что-то сосредоточенно объясняет. На СПФКС-10 Борис Васильевич уже приехать не смог, его положили в больницу.

В конце этой статьи помещены три маленьких отрывка из книги Литвинова Б.В. «Времена года» [Литвинов Б.В. «Времена года», Екатеринбург, 2003 г.]. Книга представляет собой сборник небольших рассказов, зарисовок, размышлений о жизни, как говорит автор — «эскизов» о природе, подмеченных им в период 14.04.89 по 22.05.90. Это тяжелый период жизни Бориса Васильевича, — умерли два его близких человека, тётя и мама, сам он пролежал больше месяца в больнице, непростые события происходили и в истории нашей страны. Но, как говорит автор: «Нигде в этих заметках — ни слова о событиях в жизни мира, страны и моей собственной, за исключением самого необходимого, без чего не было бы связного изложения». Эта книга раскрывает еще одну грань личности Бориса Васильевича.

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

**«ВРЕМЕНА ГОДА»***Литвинов Б.В.***Поздний вечер**

На западе в неразберихе облаков и туч угасло солнце, окрасив в жёлтый цвет небо. Ветер, сильно и настойчиво дувший весь день, стих. На улице ещё носятся на велосипедах неугомонные мальчишки, но и их поубавилось, тише стали их звонкие голоса. Тише стало и у соседей, праздновавших в саду на свежем воздухе день рождения. Тускнеют дневные краски. Идёт ночь и всё успокаивает её предвестник — поздний вечер. Только запах табаков и маттиол становится сильнее, да по-прежнему оглушительно стрекочут мелкие северные цикадки, невидимые и чуткие настолько, что их практически невозможно увидеть. Их стрёкот, запах цветов, легкая музыка и тепло напоминают южные курортные места. Иллюзию усиливает шум воды в озере и остроконечная вершина можжевельника, растущего у меня в саду и так похожего на кипарис, что нередко прохожие, увидев его, спрашивают: «Не кипарис ли это?». Нет, не кипарис качает верхушкой в моем саду, не море шумит невдалеке, и цветы пахнут не южные. Не Крым здесь, — очнись, говорю я себе, — а Урал. Теперь он — твоя родная земля, прибежище и место будущего вечного успокоения.

28.07.1989 г.

**Нет ничего лучше дождливой погоды**

Эти слова Богомила Райнова не выходят у меня из головы второй день: второй день, то усиливаясь, то совсем переставая, идёт тёплый весенний дождь. Так кончается апрель 1990 года.

Через открытую форточку доносится музыка струек воды, стекающих с крыши, пересвист птиц и ещё какие-то шорохи, поскрипывания, легкие вздохи. Наверное, развёртываются листочки, сбрасывая плотные красноватые или коричневые шубки, прятанные нежные их от морозов. Листочков ещё нет. Они только проглядывают из тугого свёрточка, но этого достаточно, чтобы ветви издали казались зеленоватыми, красноватыми, обновлёнными и похорошевшими. По ним одна за другой скользят бусинки капелек. Ветра нет, и они не падают до тех пор, пока новая порция воды от дождя не перетяжелит капельку настолько, что она начинает скользить вниз по веточке. Добежав до её кончика, капелька повисает на минутку-другую и падает на землю.

Капли дождя морщат воду в лужах, в озере, еле слышно стучат по ветвям, создавая ту особую музыку, которую можно долго слушать, застыв неподвижно и бездумно. Да и о чём думать, слившись со всем тем, частью которого мы, по существу, являемся? В редкие минуты просветления всем существом своим мы осознаем свою принадлежность к этому прекрасному миру дождя, распускающихся почек, цветущих первоцветов и молодой, задорно торчащей травы. Это изумительные минуты общности с природой возникают нечасто. Мы загубели и отошли от природы, но древняя память где-то глубоко живёт в нас и она напоминает о себе, особенно весной, под шум неспешного дождя, его звуков, пения птиц и удивительных запахов. Воистину: нет ничего лучше дождливой погоды. . .

30.04.1990 г.

**Лучший способ отдыхать, а может быть и жить**

В тёплый тихий весенний день, когда во всю сияет солнце, деревья распустились, а некоторые, как черемуха, вишни, яблони, всюду цветут, и мягкая молодая, ещё невысокая трава манит

повалиться на ней и даже соснуть под лопотание молодой листвы, нет лучше занятия, чем лежать на спине под деревьями, смотреть вверх на их тихо шумящие кроны, на бездонное небо, по которому плывут, громоздясь в фантастические образования, белые кучевые облака, и думать, если есть о чём. А лучше не думать вовсе.

Впрочем, я ещё не решил, что лучше: думать или не думать, когда валяешься на спине на тёплой земле под вольным небом и смотришь в него. Наверное, всё же лучше в это время ни о чем не думать, а просто разглядывать облака, верхушки деревьев и возносящиеся вверх стволы. Особенно интересно смотреть, как меняют облака свою форму, и стараться угадать, как и во что они изменятся. Это божественное времяпрепровождение! Я не знаю ничего лучше, чем это. . .

Может быть, и жить надо, смотря не только себе под ноги, но и в синюю манящую даль?

31.05.1989 г.

**АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОТЧЁТ  
О ЮБИЛЕЙНОЙ X МОЛОДЁЖНОЙ ШКОЛЕ-СЕМИНАРЕ  
ПО ПРОБЛЕМАМ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА**

Юбилейная X всероссийская молодёжная школа - семинар по физике конденсированного состояния вещества (СПФКС-10) проводилась с 9 по 15 ноября 2009г. в п. Верхняя Сысерть Свердловской области и традиционно носила характер научной конференции с элементами образовательной направленности. В список организаторов данного научного мероприятия вошли Уральское отделение РАН, Институт физики металлов УрО РАН (большинство членов оргкомитета – молодые сотрудники ИФМ УрО РАН), Институт теплофизики УрО РАН, а также Челябинский государственный университет и Уральский государственный университет им. А.М. Горького.

подавляющее большинство участников конференции составляли молодые сотрудники институтов РАН, студенты и аспиранты. (Количество молодых учёных в возрасте до 35 лет: 266 человек (86% от общего числа участников).

С целью повышения квалификации и расширения кругозора молодых специалистов были организованы лекции, посвящённые как различным фундаментальным аспектам современной физики твёрдого тела, так и актуальным проблемам технологического и прикладного характера. В качестве приглашённых докладчиков выступили ведущие учёные УрО РАН, а также профессора Уральского государственного университета и Челябинского государственного университета.

Общее количество участников школы-семинара составило 307 человек из 37 городов РФ, представляющих 55 научных и образовательных учреждений, а также 2 человека из стран СНГ (Казахстан) и 1 лектор из США, в том числе академиком и членом - корреспондентов РАН – 3 человека, докторов наук – 10 человек, кандидатов наук – 55 человек, аспирантов и молодых учёных без степени – 145 человек, студентов – 91 человек, школьников – 3 человека. Всего в ходе проведения школы-семинара было представлено (согласно фактической программе конференции) 246 доклада, из них лекций (приглашённых докладов) – 28, устных докладов (кратких сообщений) молодых учёных – 79, стендовых докладов – 139.

Начиная с 2007 г. научным комитетом школы-семинара составляется подробный статистический отчёт, содержащий информацию о количестве и тематике докладов различных категорий, персональном составе докладчиков, географии организаций и т.д., что позволяет сравнивать статистические данные и прослеживать временную динамику различных показателей (см. таблицы 1-3).

Таблица 1. Таблица 1. Категории докладов (согласно сборнику тезисов)

Год	2007	2008	2009
Общее количество	77	176	246
В том числе лекций	19 (25%)	19 (10.8%)	27 (11.1%)
Устных докладов	39 (51%)	73 (41.5%)	84 (34.1%)
Стендовых докладов	19 (25%)	84 (47.7%)	135 (54.9%)

Сопоставляя статистические данные за 2007 – 2009гг., можно обратить внимание на следующие тенденции. Во-первых, наблюдается значительное увеличение количества участников и представленных докладов (с 77 в 2007г. до 246 в 2009г.), в основном за счёт устных (примерно в 2 раза за рассматриваемый период) и стендовых (~ в 6 раз) докладов, при том, что количество обзорных докладов (лекций) практически не увеличивается и составляет примерно 20. Это подтверждает и персональный состав участников: около половины приглашённых докладов делают

Таблица 2. Таблица 2. Персональный состав докладчиков

Год	2007	2008	2009
Членов РАН	3 (4%)	3 (1.7%)	3 (1.2%)
Докторов наук	5 (6%)	5 (2.8%)	10 (4.1%)
Кандидатов наук	22 (29%)	35 (19.9%)	47 (19.1%)
Аспирантов + б/с	34 (44%)	85 (48.3%)	100 (40.7%)
Студентов	13 (17%)	48 (27.3%)	86 (35%)

Таблица 3. Таблица 3. География организаций (согласно сборнику тезисов)

Год	2007	2008	2009
ИФМ УрО РАН	33 (43%)	41 (23.3%)	64 (26%)
УрГУ	21 (27%)	23 (13.1%)	48 (19.5%)
УПИ	4 (5%)	8 (4.5%)	6 (2.4%)
ИТФ УрО РАН	6 (8%)	12 (6.8%)	16 (6.5%)
Екатеринбург (др.)	5 (6%)	10 (5.7%)	11 (4.5%)
Россия (не из УрО)	8 (10%)	70 (39.8%)	77 (31.3%)
ЧГУ	н/д	8 (4.5%)	13 (5.3%)
СНГ	н/д	4 (2.3%)	3 (1.2%)
ИЭФ УрО РАН	н/д	н/д	12 (4.9%)
Екатеринбург и Челябинск (всего)	69 (90%)	94 (53.4%)	153 (62%)

учёные старшего поколения (доктора наук, члены-корреспонденты и академики РАН), и еще примерно столько же — молодые кандидаты наук, однако количественный прирост этой группы докладчиков в абсолютных числах оказывается гораздо меньше, чем для аспирантов и студентов, а в процентном соотношении количество учёных, имеющих научную степень, даже снизилось от 39% в 2007г. до 24% в 2009г. Интересно, что рост числа аспирантов практически прекратился и их относительное количество (от общего числа докладчиков) составило в 2009 г. около 41%, в то время как основной рост числа участников в 2009 г. (как в относительных, так и в абсолютных цифрах) приходится на студентов.

Из данных таблицы 3 следует, что в то время как в прошлом (2008) году основное увеличение количества докладчиков произошло за счёт иногородней молодёжи, в 2009 г. максимальный вклад в рост этого показателя внесли студенты УрГУ (почти 50 человек, что составило ~20% от общего количества участников), также большое количество докладов было представлено сотрудниками ИФМ (26%), причём их общее количество увеличилось с 33 в 2007г. до 64 в 2009г. Статус всероссийской молодежной школы подтверждается значительным количеством иногородних участников — 93 докладчика (~40% от общего количества). Отметим, что в абсолютных цифрах этот показатель также демонстрирует тенденцию к росту.

#### 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 высокотехнологических отраслей промышленности, а также биологии или медицины. Такая политика способствует расширению кругозора молодых специалистов и представляется полезной в плане развития междисциплинарного научного сотрудничества.

Доклады были сгруппированы по тематике в 12 секций, наибольшая часть докладов в процентном отношении посвящена магнитным явлениям (19%), физике нано- и микроструктур (17%) и металловедению (12%). Также было представлено заметное количество докладов по теории конденсированного состояния (9%), физике поверхности (7%), высоких давлений (6%) и полупроводников (5%). Наибольший интерес вызвали следующие выступления: лекции академиков В.В. Устинова о последних достижениях наноспинтроники, В.М. Счастливецова об истории физического материаловедения, П.В. Скрипова об опытах с перегретой жидкостью, доклад зам. Председателя УрО РАН Н.В. Мушниковца о центрах коллективного пользования УрО РАН, лекция А.П. Танкеева о нелинейных структурах в конденсированных средах, доклад А.Ф. Казакова (США) о современном состоянии и перспективах научных информационных систем и баз данных, лекции А.В. Дружинина о природе коэффициента преломления и А.Р. Аржанника с демонстрацией нелинейных явлений в простых лабораторных опытах, лекция проректора УрГУ А.О. Иванова о структуре и возможностях применения магнитных жидкостей, лекции С.М. Подгорных о теплоёмкости твёрдых тел и В.О. Васьковского о гигантском магнитном импедансе.

Анализируя тенденции в научной тематике СПФКС, можно сделать следующие замечания. Несмотря на то, что в целом тематика докладов, представленных на СПФКС-10, отражает широкий спектр основных проблем физики конденсированного состояния вещества, наибольшая часть докладов как в абсолютном, так и в процентном отношении традиционно относится к исследованиям магнитных явлений, а также металло- и материаловедческой тематике, что несомненно связано с приоритетами научной работы в Институте физики металлов.

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.

# ЛЕКЦИИ





## ГРАФЕН: КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ ВПЛОТЬ ДО КОМНАТНЫХ ТЕМПЕРАТУР

*Арапов Юрий Григорьевич*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

В докладе обсуждаются методики получения и необычные электронные свойства графена – стремительно восходящей и пока самой яркой звезды на небосводе современной физики конденсированного состояния.

Основное внимание будет уделено рассмотрению следующих вопросов.

- \* Что такое графен? Технология получения моноатомного слоя углерода – графена.
- \* Электронная структура графена. Линейный закон дисперсии.
- \* «Зоопарк» носителей тока в графене и его модификациях.
- \* Квантовый эффект Холла: целочисленный (ЦКЭХ) и дробный (ДКЭХ).
- \* Особенности ЦКЭХ И ДКЭХ в графене и его модификациях.
- \* Квантовые эффекты в графене при комнатных температурах.
- \* Наблюдение парадокса Клейна в графене – временное препятствие на пути создания полевого транзистора а, следовательно, и наноэлектроники, альтернативной кремниевой.
- \* Ближайшие перспективы практического использования графена и его модификаций.

## ПОЛУПРОВОДНИКОВАЯ СПИНТРОНИКА

Аронзон Борис Аронович

НЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

1. Что такое спинтроника и почему в ней возникла необходимость?
2. Гигантский магнеторезистивный эффект и приборы на его основе.
3. Перспективы спинтроники.
4. Зачем нужна полупроводниковая спинтроника и ее преимущества?
5. Разбавленные магнитные полупроводники.
6. Свойства разбавленных магнитных полупроводников.
7. Методы исследования разбавленных магнитных полупроводников.
8. Аномальный эффект Холла и его природа.
9. Механизмы обменного взаимодействия в разбавленных магнитных полупроводниках.
10. Роль беспорядка.
11. Двумерные структуры на основе разбавленных магнитных полупроводников.
12. Структурные исследования.
13. Электрофизические свойства.
14. Магнитные свойства.
15. Особенности обменного взаимодействия в двумерных структурах на основе разбавленных магнитных полупроводников.

**О НЕКОТОРЫХ ПАРАМЕТРАХ «ГЛОБАЛЬНОГО» ПОТЕПЛЕНИЯ  
НА ТЕРРИТОРИИ БЫВШЕГО СОВЕТСКОГО СОЮЗА**

*Борисевич Алексей Николаевич*

Красноярский филиал по космическому мониторингу МЧС России,  
ФГБУ Национальный центр управления в кризисных ситуациях, г. Красноярск, Россия

1. Понятие «климат», климатическая система, климатическая норма. Климатообразующие факторы.
2. Радиационный баланс как основной климатообразующий фактор. Современные понятия и количественные оценки баланса излучения в атмосфере.
3. Существующие оценки изменения климата на территории России и ближнего зарубежья в XX веке. Недостатки широко-распространенных оценок.
4. Применение нелинейных моделей для описания климатических изменений (на примере температурного режима приземного воздуха). Пространственные и временные неоднородности климатических изменений (результаты автора).
5. Дендроклиматологические хронологии. Восстановление данных о климате за последние 2000 лет. Длиннопериодические колебания климата.

## МАГНЕТИЗМ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЁНОЧНЫХ СТРУКТУР С АМОРФНЫМИ ФЕРРИМАГНИТНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ

*Васьковский Владимир Олегович*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

1. Магнитные среды с однонаправленной анизотропией (физика явления, практические приложения).
2. Магнитные свойства аморфных плёнок типа Tb-Co, обуславливающие их использование в составе сред с однонаправленной анизотропией.
  - Ферримагнетизм аморфного состояния.
  - Эффективная магнитная анизотропия и её источники.
3. Особенности перемагничивания пленок Tb-Co/Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub> с однонаправленной анизотропией.
  - Влияние химического состава и толщины слоя Tb-Co на гистерезисные свойства двухслойной структуры Tb-Co/Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub>.
  - Влияние температуры на магнитную анизотропию плёнок Tb-Co/Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub>.
  - Регулирование межслойной связи в структуре Tb-Co/Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub> за счёт селективного отжига пермаллоя и немагнитной прослойки.
  - Гистерезисные характеристики плёнок Tb-Co/Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub> с пониженной межслойной связью.
4. Магниторезистивные свойства плёнок и плёночных элементов Tb-Co/Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub> с внутренним магнитным смещением (однонаправленной анизотропией).
  - Влияние толщинных параметров структуры и температуры отжига на анизотропию магнитосопротивления.
  - Оптимизация функциональных свойств магниторезистивной среды Tb-Co/Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub>.
  - Сенсоры магнитного поля на основе плёнок Tb-Co/Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub>.

---

**СВЕРХПРОВОДНИКИ НА ОСНОВЕ Nb<sub>3</sub>Sn:  
ОТ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ К СОЗДАНИЮ ПРОМЫШЛЕННЫХ ПРОВОДОВ**

Дерягина Ирина Леонидовна\*

Попова Е.Н., Романов Е.П.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: deryagina@mail.ru

Практическое применение сверхпроводимости стало возможным благодаря созданию низкотемпературных сверхпроводников на основе фазы A<sub>3</sub>B ( $T_C \leq 25$  К) с высокими значениями критической плотности тока, что открыло возможность создания магнитных систем для установок термоядерного синтеза, ускорительно-накопительных комплексов, приборов ЯМР. К 2010 году рынок низкотемпературных сверхпроводников составит не менее 3.6 млрд. евро [1]. Лидером в разработке промышленных технологий сверхпроводящих проводов является ВНИИНМ им. ак. Бочвара, где работа в этом направлении проводилась с середины 60-х годов, с которым с 1975 г. начала сотрудничество по исследованию структуры сверхпроводящих слоев Nb<sub>3</sub>Sn лаборатория «Прецизионных сплавов и интерметаллидов» (чл. корр. РАН Е.П. Романов) в ИФМ УрО РАН.

Задачи, которые решались при организации промышленного производства сверхпроводящих проводов на основе Nb<sub>3</sub>Sn определялись не только сверхпроводящими свойствами данного соединения, но и необходимостью преодоления недостатков, затрудняющих практическое применение: более низкая тепло- и электропроводность в «нормальном» (не сверхпроводящем) состоянии, чем у обычных металлов, высокая хрупкость и чувствительность сверхпроводящих токов к деформации. Поэтому для промышленного применения этого сплава потребовались новаторские технические решения, основным итогом которых было создание сложного композита на основе пластичной (медной или бронзовой матрицы) с большим количеством Nb волокон. Весь цикл механической обработки, необходимой для превращения массивной заготовки в тонкую (около 1 мм) проволоку осуществляется на пластичном композите, а на финишном отрезке технологической цепочки проводится термическая обработка композиционного провода, при которой олово из бронзовой матрицы или специальных оловянных вставок диффундирует в слой ниобия и формирует сверхпроводящую фазу Nb<sub>3</sub>Sn. Технологии изготовления многоволоконных композитов на основе Nb<sub>3</sub>Sn отличаются способом введения олова в ниобиевые волокна – это «бронзовая» технология и метод внутреннего источника олова. У каждой технологии есть свои плюсы и минусы, и выбор определяется требованиями потребителя. Отдельное направление исследований – легирование композитов для улучшения структуры сверхпроводящего слоя и создания дополнительных центров пиннинга, что позволило повысить верхнее критическое поле композитов на основе Nb<sub>3</sub>Sn до 20 Тл [2].

В настоящее время Россия является участником проекта по созданию международного термоядерного экспериментального реактора ИТЭР с использованием Nb<sub>3</sub>Sn для центрального солениода и обмоток тороидального поля. По результатам международного тендера ВНИИНМ с партнерами получили право разработать и выпустить 1 т сверхпроводников на основе Nb<sub>3</sub>Sn и создать токонесущие элементы для модельной катушки, успешно испытанной в Японии. После испытаний Россия стала полноправным участником проекта ИТЭР и ей поручено выпустить в течение 4-5 лет более 200 т низкотемпературных сверхпроводников, в том числе на основе соединения Nb<sub>3</sub>Sn.

1. Шиков А.К. Сверхпроводящие материалы вчера, сегодня, завтра, *Металлы Евразии*, **6**, 4, 8, (2004)
2. Шиков А.К., Никулин А.Д., Панцирный В.И. А.Е.Воробьева и др., Российские сверхпроводящие материалы для магнитных систем термоядерных реакторов, *Кабели и провода*, **1**, 260, (2000)

## НАНОКЕРАМИКА. СТОИТ ЛИ ОВЧИНКА ВЫДЕЛКИ?

*Кайгородов Антон Сергеевич*

Институт электрофизики УрО РАН, Г. Екатеринбург, Россия

E-mail: kaigor@iep.uran.ru

В последние годы резко возрос интерес к наноструктурированным материалам. При этом также резко возрос уровень спекулятивного использования данного термина в научной среде вообще и в материаловедении, в частности. В докладе предпринята попытка проведения критической оценки реального уровня развития и исследований в области получения объемных наноматериалов как в стране, так и за рубежом.

В докладе рассказывается о возможных способах синтеза объемных керамических тел с наноразмерным масштабом структуры и на примере оксидов алюминия, иттрия и циркония показано влияние среднего размера зерна на их механические, оптические и функциональные свойства, соответственно. В работе освещаются следующие вопросы:

1. Способы получения объёмных наноструктурных тел;
2. Преимущества при использовании наноматериалов;
3. Способы синтеза объёмных керамических структур с минимально возможным масштабом структуры;
4. Оценка целесообразности (читай рентабельности, конкурентоспособности) перехода от традиционной керамической к нанотехнологии получения керамики.

1. Siege R.W., Nanostructured Materials, 4, 1 (1994)
2. Groza J., International Journal of Powder Metallurgy, 35, 7 (1999)
3. Попильский Р.Я., Кондрашев Ф.В., Прессование керамических порошков, Металлургия (1968)
4. Гуткин М.Ю., Овидько И.А., Успехи механики, 1 (2003)
5. Gusev A.I., Rempel A.A. Nanocrystalline materials, Cambridge International Science Publishing (2004)
6. Mouzon J. Synthesis of Yb:Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles and fabrication of transparent polycrystalline yttria ceramics, Licentiate thesis, Lulea University of Technology (2005)
7. Андриевский Р.А., Успехи химии, 5 (1994)

**ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНОЙ МИКРОСТРУКТУРЫ  
АМОРФНЫХ И НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ**

*Комогорцев Сергей Викторович*

Институт физики СО РАН, г. Красноярск, Россия

1. Выдающиеся магнитные свойства аморфных и нанокристаллических ферромагнитных сплавов.
2. Новые представления о магнитной микроструктуре аморфных и нанокристаллических ферромагнетиков.
3. Области обменных корреляций (стохастические домены) в наномангнетиках. Теоретическое обоснование и экспериментальное наблюдение.
4. Теоретические подходы к описанию магнитной микроструктуры.
5. Магнитная корреляционная функция как источник информации о магнитной микроструктуре.
6. Экспериментальные методы исследования магнитных корреляций в аморфных и нанокристаллических ферромагнетиках.
7. Корреляционная магнитометрия как метод определения параметров случайной анизотропии и параметров стохастических доменов.

## О ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ЗАДАЧАХ МАГНИТНОЙ ДЕФЕКТΟΣКОПИИ

*Кудряшова Ольга Валерьевна\**

*Дякин В.В.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: ovu@imp.uran.ru

Магнитная дефектоскопия — это класс магнитостатических методов неразрушающего контроля, направленный на выявление могущих присутствовать в магнитном изделии макроскопических областей (дефектов) с резко отличающимися от самого изделия свойствами. Принципиальная возможность обнаружить дефект в прежде намагниченном теле связана с тем, что результирующее поле зависит от геометрической формы и физических свойств объекта контроля. Методы решения вопроса о поиске сокрытого в изделии дефекта подразделяются на экспериментальные и теоретические. В предлагаемом обзоре представлена история развития теоретических подходов к решению задачи магнитной дефектоскопии, происходившая в основном в Институте физики металлов.

Начало истории относится к тридцатым годам прошлого столетия и связано с именами В.К. Аркадьева, Р.И. Януса и С.В. Вонсовского. Благодаря их работам наметились основные подходы к расчётам поля дефектного изделия, позволяющие задействовать метод зеркальных отображений, допустимый к применению благодаря тому, что магнитостатическая задача аналогична по своей формулировке задаче электростатики. Так были сформулированы разумные ограничения к постановке задачи, зародилась специфическая терминология, и были получены выражения для так называемых магнитных диполей и их пространственных комбинаций, моделирующих те или иные дефекты, отличающиеся своей геометрией. Полный обзор задач, выполненных в данном направлении, можно найти в монографии А.Б. Сапожникова [1]. В этом же ключе М.Л. Шуром и В.Е. Щербининым уже в семидесятых годах решена интересная для практики задача. В докладе повествуется об успехах и ограничениях данного направления.

Далее будут освещены более поздние работы Н.Н. Зацепина и В.Е. Щербинина, которые предлагают специфическую модель к расчёту поля поверхностных и глубинных дефектов, охотно используемую многими авторами и по сей день.

Следующий этап развития теоретического направления в решении задач магнитной дефектоскопии связан с работами В.В. Дякина и его соавторов, выполненными из первых принципов на основе интегро-дифференциального уравнения магнитостатики. В докладе будут приведены основные результаты, существенно пополнившие теоретический арсенал магнитной дефектоскопии.

В основном учёные были заняты решением прямой задачи о нахождении поля от намагниченного внешним полем тела с заданной геометрией границ и дефекта при заданных свойствах среды (магнитная проницаемость не зависит от поля и координат). Обратная задача по раздельному определению физических и геометрических характеристик внутреннего дефекта может быть решена только с ограничениями, поскольку доказано, что единственного решения в общей постановке она не имеет.

Помимо вышеперечисленных моментов остановимся и на вопросе возможного использования стандартных программ для решения магнитостатической задачи. Обсудим несомненные выгоды и неизбежные столкновения с подводными препятствиями.

*Работа выполнена при частичной поддержке программы Президиума РАН.*

1. Сапожников А.Б., Теоретические основы электромагнитной дефектоскопии металлических тел, Томск: Издательство ТГУ (1980)



## О ДИАГНОСТИКЕ МЕТЕОРИТОВ

*Логинов Валерий Николаевич*

*Сергеева В.В.*

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

В результате научно-технического прогресса в минералогии обозначились три ветви: земная, космическая и техническая минералогия. В этом отношении появились определённые трудности в диагностике метеоритов. В качестве метеоритов представляются иногда горные породы земного происхождения и продукты технологических процессов – шлаков, ферросплавов, выплавленного железа. В этой связи приобретают большое значение условия находки того или иного образца. Таким образом, первым критерием является – условие нахождения образца.

1.Условия нахождения. Не всегда удаётся точно определить падение того или иного образца, иногда условия нахождения привлекают внимание первооткрывателей. Так, например, в Курганской области, где распространены рыхлые отложения и нет каменистых грунтов, обломок странной формы привлекает внимание. Так, механизатором Вершининым при распахивании поля был найден образец шарообразной формы. Он был расколот, и сегмент этого образца попал в наши руки. При петрографических исследованиях образец оказался метеоритом, который по месту находки был назван Мокроусово. Геологом В.П. Сиговым в корнях поваленного дерева был найден образец, определённый как метеорит и назван Северный Колчим.

2.Текстурные особенности играют важную роль в диагностике метеоритов. Текстура по определению петрографов и минерологов определяется степенью выполнения пространства и соотношением минеральных агрегатов. Так выделяется пузырчатые, пористые и массивные текстуры. Для метеоритов характерны массивные и однородные текстуры. Характерной текстурой является хондровая текстура, отличающаяся от земных оолитовых текстур, которые являются концентрически-зонального строения. Хондровые структуры имеют параллельное строение – полоски оливина и других минералов чередуются с мелкозернистым строением. Выделяются лучистые хондры, асимметричные хондры. Корочка плавления также отличительная черта метеоритов, но мощность невелика и не превышает мощности 1 мм. Часто при дроблении метеорита в атмосфере земли кора плавления разрушается и образуется обычный зернистый излом.

Кристаллооптические исследования в отражённом и проходящем свете дают ясное представление о структуре, минеральном составе и внутреннем строению минералов. В отражённом свете определяются непрозрачные минералы – комасит, троилит, добреелит и другие минералы. В проходящем свете определяются главные прозрачные минералы: оливин, пироксен; хорошо выделяются особенности внутреннего строения хондр – параллельно лучистые, ассиметрично лучистые, зональные.

3.Структура образца определяется размером, формой и степенью идиоморфизма отдельных минералов. Для метеорита характерна полнокристаллическая структура с наличием хондр, обычно, специфической внутренней структурой. Стекловатая структура обычно характерна для тектитов.

Минеральный состав метеоритов обладает некоторыми особенностями, характерными только для них. Так, в метеоритах обычно встречается элементарное железо, чаще всего с примесью элементарного никеля. Для метеоритов характерны такие минералы как троилит, ольдгамит, которые довольно редки для земных горных пород.

Химический состав метеоритов отражает ту среду в которой они существовали, а именно – недостатком кислорода. В этом отношении метод А.Н.Заварницкого, разработанный для горных пород, неприменим для метеоритов. Колебания содержания железа от 100 до единиц процентов. Для метеоритов и других космических образований планет, спутников, астероидов применима

методика, учитывающая содержание элементарного железа и других окислов их отношению к содержанию кремнезёма. Это отношение можно назвать кислородный потенциал:

$$O = \frac{OR_2O + ORO + OR_2O_3 + ORO_2 + OR_2O_5}{R + RR_2O + RRO + RR_2O_3 + RO_2 + OR_2O_5} = \frac{AO}{KO}$$

Палласиты имеют  $\rho O = 1.03$ ; железо – кам  $\rho O =$  от 1 до 2.0; мезосидериты – 1.026; хондриты – 1.012–1.404; лунный грунт – 1.411, для марсианского грунта – 1.755–1.898, для венерианского грунта – 1.500–1.550.

На диаграмме, составленной в координатах – по ординате – кислородный потенциал, по абсциссе – содержание кремнезёма в молекулярных процентах. Выделяются рои фигуративных точек хондритов, железистых хондритов, маложелезистых хондритов, мезосидеритов (средне-железистые), сидеритов, тектитов. Также довольно чётко выделяются рои интрузивных горных пород, лунного реголита, марсианских и венерианских грунтов.

Термический анализ. При исследовании метеоритов выяснилось, что точка Кюри для элементарного железа оказалась 760 °С, а это значительно меньше (как выяснилось связано с содержанием никеля, точка Кюри которого, ниже). Это даёт дополнительные возможности для индивидуальной характеристики отдельных минералов.

Рентгеноструктурные исследования минералов.

Характеристика отдельных минералов выявляет индивидуальные особенности минерала. Измеренное межплоскостное расстояние  $d(114)$  для троилита из разных метеоритов даёт значительные отличия – Урал, Озёрный – 2.090Å; Оханск, Каргаполье – 2.065Å.

При исследовании метеоритов особенно важно комплексное применение методов. Это тем более важно, что применение дистанционных исследований метеоритов, приводимое в последнее время, нуждается в сопоставлении с лабораторными исследованиями – спектро-фотометрией и рентгеноструктурными исследованиями.

**КОНТУРНЫЕ ТЕПЛОВЫЕ ТРУБЫ –  
ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЕ ТЕПЛОПЕРЕДАЮЩИЕ УСТРОЙСТВА  
ДЛЯ СИСТЕМ ТЕРМОРЕГУЛИРОВАНИЯ**

Майданик Юрий Фольевич

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

1. История создания КТТ.
2. Принцип действия и основные условия работоспособности.
3. Конструктивные варианты и рабочие характеристики.
4. Области применения и перспективы.

**НЕЙТРОННЫЙ ДИФРАКТОМЕТР Д76  
НА ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОМ РЕАКТОРЕ ИВВ-2М (Г.ЗАРЕЧНЫЙ):  
СПОСОБЫ СКАНИРОВАНИЯ ОБРАТНОГО ПРОСТРАНСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ  
И ВОЗМОЖНЫЕ ПУТИ МОДЕРНИЗАЦИИ УСТАНОВКИ**

*Максимов Вениамин Игоревич\*, Дубинин С.Ф.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

В докладе анализируется текущее состояние дифрактометра Д76 (схема, рис. 1), поддерживающего исследования кристаллической и магнитной структуры соединений на объёмных монокристаллах с использованием монохроматизированного пучка нейтронов. Внимание уделено методике эксперимента, достоинствам и недостаткам установки с учётом современных тенденций в нейтронографии монокристаллов. Делается вывод о назревшей необходимости модернизации Д76. Содержание доклада включает в себя следующие вопросы.



Рис. 1. Схема дифрактометра Д76 на реакторе ИВВ-2М

- I. Дифрактометр Д76 (реактор ИВВ-2М, г. Заречный): основные узлы и «пользовательские» характеристики прибора.
- II. Основные этапы нейтрон-дифракционного эксперимента на монокристалле.
  - 1) Юстировка образца. Краткие сведения из дифрактометрической гониометрии.
  - 2) Выбор способа сканирования обратного пространства монокристалла.
- III. Практическая реализация способов сканирования обратного пространства исследуемого монокристалла на дифрактометре Д76. Решаемые задачи и примеры получаемых нейтрон-дифракционных картин (приведены картины рассеяния нейтронов, полученные на образцах легированных  $3d$  - ионами полупроводников II–VI, III–VI).
- IV. Возможные пути модернизации дифрактометра Д76.
  - 1) Современные нейтронные дифрактометры для проведения структурных исследований на образцах-монокристаллах, установленные в ведущих нейтронных материаловедческих центрах мира.
  - 2) Замена детекторной системы на дифрактометре Д76.
- V. Заключение. План подготовительных мероприятий для разработки схемы модернизации дифрактометра Д76.

*Работа поддержана грантом ОУС по физ.-техн. наукам УрО РАН № 1-М.*

1. Нозик Ю.З. и др., Структурная нейтронография, Т.1., «Атомиздат» (1979)
2. Материалы ВНШ для молодежи, г. Дубна (2009), (<http://fnp.jinr.ru/14/>)
3. ILL: Neutrons for Science. Yellow Book, Ed. by Cicognani G., ILL (2008), (<http://www.ill.eu/instruments-support/>)
4. Belushkin A.V., Pramana – J. Phys., **71**, 639 (2008).

**МАГНИТНЫЕ ОКСИДЫ:  
ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ И СПИНОВАЯ ДИНАМИКА ПО ДАННЫМ ЯМР**

*Михалёв Константин Николаевич*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: mikhalev@imp.uran.ru

Магнитные оксиды, включающие широкий класс материалов (манганиты, ферроэлектрики, мультиферроики), интенсивно исследуются [1,2], так как представляют значительный интерес и с практической, и с научной точки зрения.

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

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

\* микроскопическое фазовое расслоение в манганитах по данным ЯМР  $^{55}\text{Mn}$  в локальном поле в системах  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{1-x}\text{MnO}_3$  [3];

\* особенности фазовой диаграммы и магнитные неоднородности в манганитах по данным ЯМР  $^{17}\text{O}$  [4,5];

\* огромный динамический изотоп-эффект в системе  $(\text{La}_{0.25}\text{Pr}_{0.25})_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$  при изотопном замещении  $^{16}\text{O} \rightarrow ^{18}\text{O}$  по данным ЯМР  $^{139}\text{La}$  [6];

\* мультиферроики и несоразмерные магнитные структуры: манганиты, ферриты и КагOME-фазы по данным ЯМР  $^{55}\text{Mn}$ ,  $^{57}\text{Fe}$ ,  $^{51}\text{V}$ .

1. Izyumskaya N., Alivov Ya., Morkoc H., Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, **34**, 89 (2009)
2. Dagotto E., New Journal of Physics, **7**, 67 (2005)
3. Mikhalev K.N., Fogel I., Lekomtsev C.A., Gerashenko A.P., Yakubovskii A.Yu., Kaul' A.R., J. of Magnetism and Mag. Mat., **258-259**, 268 (2003)
4. Trokiner A., Verkhovskii S., Yakubovskii A., Kumagai K., Monod P., Mikhalev K., Buzlukov A., Furukawa Yu., Hur N., Cheng S.-W., Phys.Rev.B, **77**, 134436 (2008)
5. Trokiner A., Verkhovskii S., Yakubovskii A., Gerashenko A., Monod P., Kumagai K., Mikhalev K., Buzlukov A., Litvinova Z., Gorbenko O., Kaul A., Kartavtzeva M., Phys.Rev.B, **79**, 214414 (2009)
6. Михалев К.Н., Литвинов И.Е., Нигаматьянова З.Н., Якубовский А.Ю., Кауль А.Р., Горбенко О.Ю., Кумагаи К., Фурукава Ю., Известия РАН, серия физическая, **71**, 626 (2007)

## ИНФРАКРАСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

*Мостовщикова Елена Викторовна*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

В докладе рассказывается о взаимодействии света с полупроводниковыми материалами, механизмах отражения или поглощения света полупроводником в различных областях инфракрасного диапазона. На примере манганитов лантана и других магнитных полупроводников демонстрируется, какая информация о свойствах полупроводника может быть получена при изучении спектров отражения или поглощения. Основное внимание будет уделено рассмотрению следующих вопросов:

1. Краткий обзор основных типов взаимодействия света с конденсированной средой.
2. Оптические константы и методы их определения.
3. Процессы поглощения в полупроводниках. Фундаментальное поглощение. Прямые и непрямые межзонные переходы.
4. Взаимодействие света с кристаллической решёткой.
5. Взаимодействие света со свободными носителями заряда.
6. Исследование зарядово-неоднородного состояния полупроводников.
7. Эффект магнитопоглощения (магнитопропускания).

## ПОСТОЯННЫЕ МАГНИТЫ: ФИЗИКА, ТЕХНОЛОГИИ, ПРИМЕНЕНИЕ

Мушников Николай Варфоломеевич

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

1. Определение и классификация магнитотвёрдых материалов.
2. Параметры петли магнитного гистерезиса.
3. Фундаментальные магнитные характеристики, определяющие свойства магнитотвёрдых материалов.
4. Постоянные магниты с особыми физическими свойствами.
5. Современные технологии производства постоянных магнитов
6. Мировой рынок редкоземельных постоянных магнитов.
7. Применение постоянных магнитов.

## ТЁМНАЯ МАТЕРИЯ, ТЁМНАЯ ЭНЕРГИЯ И ДРУГИЕ ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННЫХ КОСМОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Орлов Илья Олегович

Институт ядерной физики СО РАН, г. Новосибирск, Россия

1. С чего всё начиналось
  - Специальная и общая теория относительности Эйнштейна.
  - Деситтеровские и фридмановские модели.
  - Расширение Вселенной, постоянная Хаббла.
  - Альфер, Бете, Гамов — нуклеосинтез и реликтовое излучение.
2. Идём дальше — галерея нобелевских премий
  - Открытие реликтового излучения (Пензиас, Вильсон).
  - Сохранения чётности и электрослабое взаимодействие (Глэшоу, Салам, Вайнберг).
  - Нарушения чётностей (Кронин, Фитч).
  - Чёрные дыры и эволюция звёзд (Чандрасекар, Фаулер).
3. Современные достижения и проблемы
  - Космические нейтрино и их превращения.
  - Гравитационные проблемы — тёмная материя?
  - Ускоряющееся расширение Вселенной — тёмная энергия?
  - Симметрия и асимметрия реликтового излучения.
  - Проблемы принципа причинности и инфляционная модель.
  - Великие стены в космосе.
  - Бозон Хиггса - ну как же без него...
4. Итог — современные представления о схеме развития Вселенной.



**СВЕРХБЫСТРАЯ МАГНИТНАЯ ДИНАМИКА:  
ЭКСПЕРИМЕНТ И ТЕОРИЯ**

*Орлова Наталья Борисовна*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

1. Влияние фемтосекундных импульсов на магнитное состояние магнетика (эксперимент).
2. Существующие представления о характерных временах спиновой динамики магнитоупорядоченных веществах.
3. Результаты экспериментальных исследований магнитоупорядоченных веществ с помощью фемтосекундных лазерных импульсов.
4. Существующие теории фемтомагнетизма.
5. Модель оптической переориентации при оптическом возбуждении орбитальных моментов (наша модель).

## ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС КАК МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕЩЕСТВА

*Пискунов Юрий Владимирович*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

В докладе рассказывается о явлении ядерного магнитного резонанса (ЯМР), а также на конкретных примерах демонстрируются возможности использования этого явления для изучения физико-химических свойств вещества, в частности твёрдого тела. Основное внимание будет уделено рассмотрению следующих вопросов.

1. Суть явления магнитного резонанса.
2. Суть метода ЯМР.
3. Наблюдение сигнала ЯМР.
4. Основные параметры, которыми оперирует метод ЯМР: спектр ЯМР, сдвиг линии ЯМР, времена спин-решеточной и спин-спиновой релаксации ядерных моментов.
5. Использование ЯМР для обнаружения и измерения электрических и магнитных взаимодействий электронов и ядер в веществе.
6. Изучение методами ЯМР спектра магнитных флуктуаций в твёрдом теле.
7. Особенности ЯМР как локального метода исследования вещества.
8. Двойной ядерно-ядерный магнитный резонанс.
9. Конкретные примеры использования методик ЯМР в сверхпроводниках и магнетиках.

## МАГНИТНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ НА СКВИДе

Подгорных Сергей Михайлович

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: sp@imp.uran.ru

*"Few subjects in Science are more difficult to understand than magnetism."*

*Encyclopedia Britannica, 15th Edition (1989)*

Успех в изучении магнитных свойств вещества во многом определяется пониманием цели, которую ставит перед собой исследователь. В одном случае необходимо получить температуру и критические магнитные поля сверхпроводящего или магнитного перехода, намагниченность насыщения или значение эффективного магнитного момента на атом. В другом – определить магнитное состояние вещества при различных температурах: парамагнетик или диамагнетик, антиферро- или ферромагнетик, или другое. Существует около 14 возможных типов магнитного состояния. В более сложных задачах требуется определить объём магнитной или сверхпроводящей фазы в образце или времена магнитной или структурной релаксации, которые могут существенным образом изменять наблюдаемые свойства. Исследователь опирается на возможности магнитометров, среди которых современным стандартом в международных магнитных центрах коллективного пользования стал СКВИД магнитометр фирмы Quantum Design.

Магнитометр MPMS-5XL: Использование СКВИДа позволяет измерять магнитный момент образца с чувствительностью  $10^{-8} \text{emu}^*$  или  $10^{-11} \text{Am}^2$  в температурном диапазоне  $1.8\text{K} < T < 400\text{K}$ , и  $300\text{K} < T < 800\text{K}$  при использовании высокотемпературной опции в полях до 5 Тл. Динамические свойства магнетиков в диапазоне частот от 0.001 Гц до 1500 Гц и статические характеристики могут быть измерены в зависимости от магнитной и температурной предыстории и измеряться по программе при необходимости исследования временных зависимостей от нескольких минут или часов до нескольких суток.

Для начинающих исследователей алгоритм изучения магнитных свойств:

1. Измерение кривой намагничивания вещества при комнатной температуре  $M(H)$  при увеличении и при уменьшении магнитного поля;
2. Измерение температурной зависимости начальной магнитной восприимчивости для определения температур возможных магнитных переходов, учитывая, что для ферромагнитных материалов величина начальной восприимчивости определяется формой образца (размагничивающим фактором), а не веществом образца;
3. Проведение измерений температурных зависимостей намагниченности в постоянном магнитном поле в выбранном диапазоне температур с учётом предыдущих измерений и заданием соответствующей магнитной предыстории образца.

Книга С.Тикадзуми (Soshin Chikazumi) является одним из лучших учебников по магнетизму и практике изучения магнитных свойств, однако она написана в системе единиц МКС, не совпадающей ни с СИ, ни с СГС [1].

В докладе представлен обзор, основанный преимущественно на исследованиях и научных интересах автора, проблем физики конденсированного состояния, которые возникают при анализе магнитных свойств твёрдых тел. Приводятся практические рекомендации по постановке экспериментов на установках MPMS-5XL и PPMS-9 (Quantum Design) в Отделе магнитных измерений ИФМ УрО РАН.

1. Тикадзуми С., Физика ферромагнетизма. Магнитные характеристики и практические применения, М.Мир (1987).

\*  $1 \text{emu} = 10^{-3} \text{Am}^2$ ;  $1 \text{emu/g} = 1 \text{Am}^2/\text{kg}$ ;  $1 \text{emu} = 1\text{G} * \text{cm}^3$ , где  $1\text{G}(\text{Gauss}) = 1 \text{Гс}(\text{Гаусс})$ .

## РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ НА СВОЙСТВАХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Ремпель Андрей Андреевич

Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

1. Физические и химические методы получения наноматериалов.
2. Зависимость электронного спектра твёрдого тела от его размерности.
3. Влияние размерности и размера на физические свойства твёрдых тел.
4. Размерные эффекты на структуре, механических и электронных свойствах наноматериалов.

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ  
И ВОЗМОЖНОЕ ПСЕВДОЩЕЛЕВОЕ ПОВЕДЕНИЕ В ПНИКТИДАХ ЖЕЛЕЗА**

*Садовский Михаил Виссарионович*, Академик РАН

Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

1. Электронная структура и ARPES:

- Редкоземельная загадка?
- Корреляция  $T_C$  и плотности состояний.
- Поверхности Ферми.
- Псевдощель?

2. Куперовское спаривание в многозонной системе:

- Соотношения щелей на разных листах поверхности Ферми.
- Эффективная спаривательная константа — от слабой к сильной связи.

## **ФЛУКТУАЦИИ С $1/f$ СПЕКТРОМ МОЩНОСТИ**

*Скоков Вячеслав Николаевич*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

1. Случайные процессы. Фликкер-шум.
2. Примеры  $1/f$  флуктуаций и модели случайных процессов с  $1/f$  спектром.
3. Самоорганизованная критичность.
4. Флуктуации с  $1/f$  спектром мощности в случайных процессах с фазовыми переходами. Модель и экспериментальные результаты.

## ПОДДЕРЖКА НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ

Телегин Андрей Владимирович

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

В ходе лекции будет дан краткий обзор возможностей получения финансовой и другой помощи для реализации некоторого научного или образовательного проекта естественнонаучного направления, для поддержки фундаментальных исследований и участия молодого учёного в конференциях или стажировках.

Целью лекции является научить молодого учёного оперативно искать, обрабатывать и обмениваться информацией, связанной с получением финансовой поддержки.

Краткий план лекции:

1. Молодой учёный и его роль в науке.
2. Что такое грант?
3. Типы грантов:
  - государственные, частные, иностранные, персональные и коллективные;
  - гранты на исследования, поездку на конференцию, стажировку, академический обмен, стипендии.
4. Методика написания заявки на грант, обмен опытом получения грантов.
5. Рекомендации грантозаявителям, основанные на личном опыте, обмен мнениями.





# **МАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ**



## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАРОЖДЕНИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ В ПЛАСТИНЕ-(100) ФЕРРИТА-ГРАНАТА

*Бельский И.Е.\**, Памятных Л.А., Шматов Г.А.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ilyabelskiy@mail.ru

Представлены результаты экспериментального и теоретического исследования начальной стадии зарождения доменной структуры под действием внешнего магнитного поля.

Экспериментальное изучение начальной стадии перемагничивания проведено на пластине - (100) феррита-граната  $(\text{EuEr})_3(\text{FeGa})_5\text{O}_{12}$  в планарном магнитном поле с помощью магнитооптического эффекта Фарадея.

В рамках микромагнитного подхода найдено равновесное распределение намагниченности в пластине - (100) в планарном магнитном поле с учётом кубической и наведённой одноосной магнитной анизотропии. Показано, что минимуму полной энергии пластины соответствует отклонение вектора намагниченности  $\mathbf{M}$  от вектора напряжённости магнитного поля  $\mathbf{H}$ . Это свидетельствует о том, что полосы зарождающейся магнитной неоднородности ориентируются не параллельно направлению магнитного поля, а составляют с полем некоторый угол. В частности, во внешнем поле, равном по модулю полю кубической анизотропии, это отклонение достигает  $\sim 14^\circ$ . При этом угол между вектором напряжённости поля и кристаллографической осью [010] равен  $10^\circ$ .

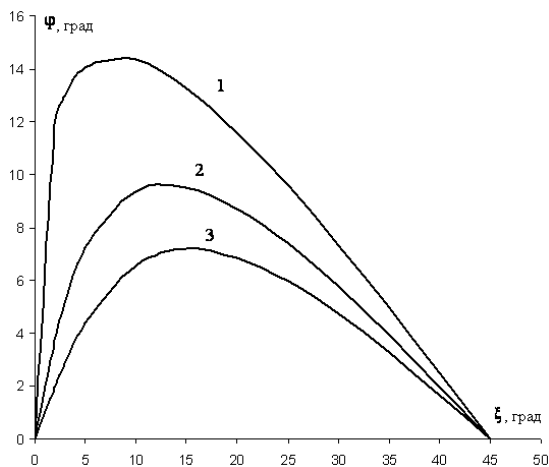


Рис. 1. Зависимость ориентации вектора намагниченности  $\mathbf{M}$  от ориентации внешнего магнитного поля  $\mathbf{H}$

На рис. 1 приведена зависимость ориентации вектора намагниченности относительно направления магнитного поля (угол  $\varphi$ ) в пластине - (100) от ориентации магнитного поля относительно кристаллографической оси [010] (угол  $\xi$ ) при различных значениях отношения  $h/\beta_1$  (кривая 1 –  $h/\beta_1 = -1$ , кривая 2 –  $h/\beta_1 = -1.5$ , кривая 3 –  $h/\beta_1 = -2$ ). Здесь  $\beta_1$  – безразмерная константа кубической анизотропии,  $h$  – напряжённость магнитного поля в приведённых единицах. Как видно из рисунка, функция  $\varphi(\xi)$  имеет максимум, положение которого зависит от величины  $h/\beta_1$ . При увеличении поля кубической анизотропии по сравнению с величиной приложенного поля вектор намагниченности  $\mathbf{M}$  отклоняется от вектора напряжённости внешнего поля  $\mathbf{H}$  на больший угол.

Для сопоставления экспериментальных результатов с выводами теории необходимо оценить поле зарождения магнитной неоднородности и её геометрические параметры (ориентацию и период).

## ОДНОНАПРАВЛЕННАЯ ОБМЕННАЯ АНИЗОТРОПИЯ В БИСЛОЯХ ПЕРМАЛЛОЙ-МАРГАНЕЦ

*Блинов И.В.\* , Миляев М.А., Попов В.В.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: blinoviv@mail.ru

В работе исследовано влияние температуры и времени отжига на магнитные свойства тонких плёнок пермаллой-марганец. Напыление  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$  производилось ионно-плазменным методом на модернизированной магнетронной установке УРМЗ-013 при давлении рабочего газа (аргона)  $10^{-3}$  мм.рт.ст. Затем полученные образцы помещались в установку электронно-лучевого напыления Varian, и при давлении  $10^{-6}$  мм.рт.ст. проводилось напыление марганца. Для предотвращения окисления, полученные плёнки покрывались тонким слоем тантала. Таким образом, была получена следующая структура  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}(30 \text{ нм})/\text{Mn}(100 \text{ нм})/\text{Ta}(10 \text{ нм})$ . Отжиг исследуемых образцов выполнялся при вакууме  $10^{-6}$  мм.рт.ст в постоянном магнитном поле 2 кЭ, приложенном в плоскости плёнки. Магнитные свойства были изучены при помощи вибромагнитометра. Магнитное поле при измерении совпадало с направлением поля при отжиге.

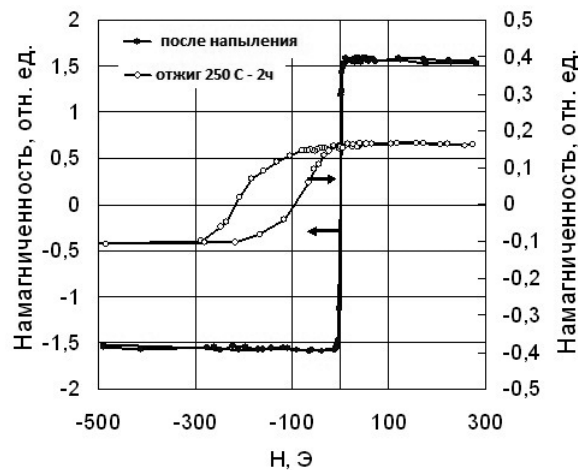


Рис. 1. Петли гистерезиса образцов  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ -Mn до и после отжига в магнитном поле при температуре  $250^\circ\text{C}$  в течение 2 часов

Проведённые исследования показали, что после напыления исследуемый образец обладает малой коэрцитивной силой  $\sim 1$  Э. После отжига в магнитном поле происходит увеличение коэрцитивной силы, а также наблюдается сдвиг петли гистерезиса по оси поля, что согласуется с ранее проведенными исследованиями [1,2].

Максимальный зафиксированный сдвиг петли гистерезиса составляет 150 Э для образца, отожжённого при  $250^\circ\text{C}$  в течение 2 часов. Явление однонаправленной обменной анизотропии в исследуемых образцах обусловлено обменным взаимодействием  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$  с богатым марганцем антиферромагнитным твёрдым раствором NiFeMn, образовавшегося в результате диффузионного взаимодействия пермаллоя и марганца.

*Работа выполнена при поддержке Президиума РАН (проект по программе Президиума РАН «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов»).*

1. Haiwen, Bo Bian, Zailong Zhuang etc., IEEE Transactions on Magnetics, **36**, 2644 (2000)
2. Jamai Ben Youseff, David Spenato, Journal of Applied Physics, **91**, 7239 (2002)

## РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ МАГНИТНОГО СМЕЩЕНИЯ ДЛЯ ПЛЁНОЧНЫХ МАГНИТОИМПЕДАНСНЫХ СЕНСОРОВ

Бучкевич А.А.\*, Кулеш Н.А., Васьковский В.О.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: buchkevich@gmail.com

Вопрос улучшения функциональных характеристик плёночных магниточувствительных элементов занимает приоритетную позицию в ряде задач магнитной сенсорики. В качестве одного из перспективных вариантов решения этой задачи рассматриваются слоистые плёночные структуры с эффектом гигантского магнитного импеданса (ГМИ) [1]. Объектом исследования в данной работе выбраны образцы такого рода элементов, полученных методом фотолитографии с использованием структурированных многослойных плёнок  $[\text{Fe}_{19}\text{Ni}_{81}(100\text{нм})/\text{Cu}(3\text{нм})]_4/\text{Fe}_{19}\text{Ni}_{81}(100\text{нм})/\text{Cu}(500\text{нм})/[\text{Fe}_{19}\text{Ni}_{81}(100\text{нм})/\text{Cu}(3\text{нм})]_4/\text{Fe}_{19}\text{Ni}_{81}(100\text{нм})$ .

Геометрия элементов схематически показана на вставке рисунка 1.

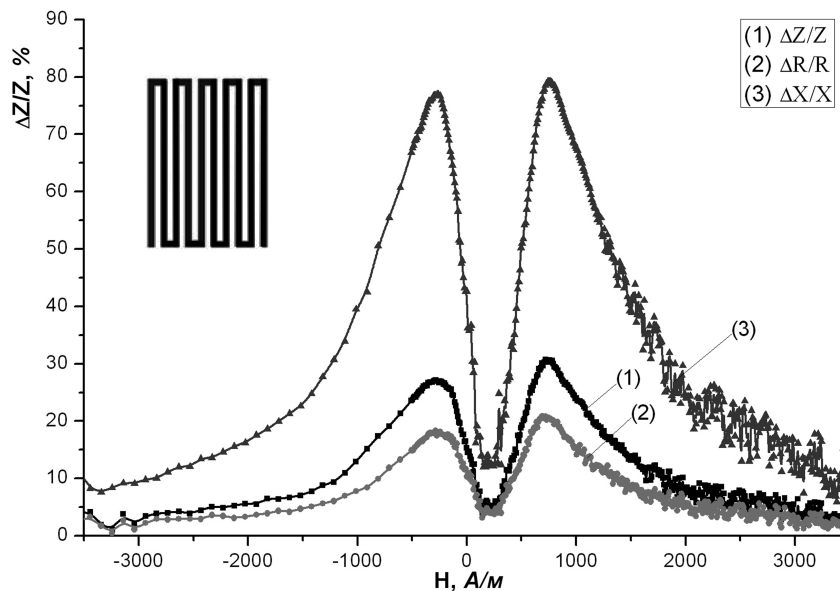


Рис. 1. Относительное изменение полного импеданса ( $Z$ ) и его активной ( $R$ ) и индуктивной ( $X$ ) составляющих во внешнем магнитном поле на образце, находящемся в условиях магнитного смещения

Для реализации нечётной функции преобразования в указанных ГМИ-элементах решалась задача создания системы магнитного смещения. Численным методом с использованием пакета COMSOL Multiphysics 3.5 рассчитаны оптимальные конфигурации магнитных систем, состоящих из прямоугольных элементов и создающих достаточно однородное магнитное поле напряжённостью 240 и 800 А/м в области нахождения элемента. Первый вариант ориентирован на использование восходящей, а второй – нисходящей ветвей магнитоимпедансной кривой чувствительного элемента. Экспериментально установлена эффективность разработанных магнитных систем.

1. Kurlyandskaya G.V., Encyclopedia of Sensors, 4, 205-237 (2006)

**ИЗМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ  
В РЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ НЕПТУНИЯ И КЮРИЯ  
ПОД ДАВЛЕНИЕМ**

*Быструшкин В.Б.<sup>1,\*</sup>, Дьяченко А.А.<sup>1</sup>, Лукьянов А.В.<sup>2</sup>, Шориков А.О.<sup>2</sup>, Циовкин Ю.Ю.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: vasilii.bystrushkin@mail.ru

Эксперименты по приложению давления для трансурановых металлов [1] свидетельствуют о нескольких фазовых переходах с постепенным уменьшением объема ячейки  $Np$ , а в  $Sm$  сопровождающиеся сокращениями объемов элементарной ячейки (до 11.7 % объема ячейки при давлении 95.5 ГПа). Подобные скачки объемов происходят при структурном переходе, но также связаны с резкой делокализацией электронов  $5f$ - оболочки. Исследование магнитного состояния трансурановых металлов в малых объемах позволит лучше понять причины фазовых переходов под давлением. В данной работе была вычислена электронная структура в рамках метода LDA+U+SO для реальных структур  $Np$  и  $Sm$ , а так же ОЦК  $Np$  и ГЦК  $Sm$  с различными объемами элементарной ячейки, соответствующими различным значениям приложенного давления (приближение всестороннего сжатия).

Теоретическое исследование актиноидных систем, таких как металлы кюриев, нептуний, осложняется присутствием в  $5f$ - оболочке сильного спин-орбитального взаимодействия, сопоставимого по величине с обменным кулоновским взаимодействием [2]. Конкуренция этих взаимодействий приводит к реализации не LS (Рассел-Саундерсовского) или  $jj$  типа связи, а промежуточного типа связи, который больше соответствует  $5f$ - электронам в трансурановых металлах из-за сильного спин-орбитального взаимодействия. Поэтому для исследования трансурановых элементов и их соединений одинаково необходимо учитывать как недиагональные по спиновым переменным матричные элементы кулоновского взаимодействия, так и спин-орбитальное взаимодействие, как в методе LDA+U+SO, использованном в данной работе.

Полученные результаты показывают, что в рамках статического среднего поля (метода LDA+U+SO) воспроизводится постепенная делокализация  $5f$ - электронов  $Np$  под давлением, сопровождающаяся уменьшением магнитных моментов в  $5f$ - оболочке нептуния, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. В плотности электронных состояний наблюдается уширение зон и небольшое смещение их центров тяжести при уменьшении объема ячейки, что соответствует увеличению давления. В  $Sm$  воспроизводится постепенная делокализация без существенных сокращений объемов элементарной ячейки. Возможно, учёт динамических электронных корреляций, например, с помощью динамической теории среднего поля (DMFT), позволит воспроизвести особенности электронной делокализации  $f$ - электронов  $Sm$ , связанных со скачками объемов при приложении давления.

1. Heathman S., et al., Science, **309**, 110 (2005)

2. Shorikov A.O., Lukyanov A.V., Korotin M.A., and Anisimov V.I., Phys. Rev. B, **72**, 024458 (2005)

**ОСОБЕННОСТИ МЕЖКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СПЛАВАХ R3M-3d-МЕТАЛЛ-БОР  
И ЕГО СВЯЗЬ С РАЗМЕРНОСТЬЮ И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫМИ МАГНИТНЫМИ  
КОНСТАНТАМИ ФАЗОВЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ**

*Волегов А.С.\*, Кудреватых Н.В., Андреев С.В., Сабирьянова Э.А., Незнахин Д.С., Маркин П.Е.*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: aleksey.volegov@gmail.com

Наноструктурированные материалы, в частности магнитотвёрдые, достаточно давно привлекают внимание исследователей, как с точки зрения прикладных задач, так и фундаментальных. Одной из фундаментальных задач является выяснение природы межзёренного обменного взаимодействия в наноструктурированных интерметаллических редкоземельных соединениях системы R–Fe–B за-, до- и стехиометрического составов по содержанию редкоземельного элемента в сравнении с высокоанизотропным интерметаллидом  $R_2Fe_{14}B$  и влиянии его (взаимодействия) на фундаментальные физические свойства (температура Кюри, температура спиновой переориентации [1]), а также определение энергии взаимодействия при различных типах и толщинах прослойки между взаимодействующими кристаллитами.

Хорошо известно, что при переходе от макроскопических кристаллов к наноразмерным, могут существенно изменяться фундаментальные константы материала ввиду существенного увеличения доли поверхностных атомов. Таким образом, необходимо разделять исключительно размерные эффекты и эффекты межзёренного взаимодействия.

В настоящей работе установлены зависимости температуры спиновой переориентации и температуры Кюри от размеров кристаллитов высокоанизотропной фазы  $Nd_2Fe_{14}B$ . Авторами предложен оригинальный метод разделения влияния межзёренного обменного взаимодействия и вклада поверхности кристаллитов в изменение эффективных констант анизотропии наноструктурированного материала. Экспериментально обоснован метод определения температуры спин-переориентационного перехода по экстремуму производной  $d\chi'(T)/dT$  на поликристаллах.

Предложена методика, позволяющая экспериментально определять величину энергии межзёренного взаимодействия в сплавах с различной морфологией при наличии спонтанного спин-переориентационного перехода. С использованием предложенной методики впервые определена величина межзёренного обменного взаимодействия в наноструктурированных сплавах системы Nd–Fe–B.

*Авторы выражают благодарность Н.В. Николаевой (ИФМ УрО РАН) за помощь в проведении электронно-микроскопических исследований.*

1. Kou X.C., Dahlgren M., Grossinger R., Wiesinger G., J. Appl. Phys, **81**, 4428, (1997)

**ВОЗБУЖДЕНИЕ МАГНИТОУПРУГИХ КОЛЕБАНИЙ  
В АМОРФНОМ МАГНИТОСТРИКЦИОННОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ  
С НАВЕДЁННОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ**

*Голыгин Е.А.\* , Ярычева З.Л., Гаврилюк А.А., Петров А.Л.*

Иркутский государственный университет, г. Иркутск, Россия

E-mail: egolygin@arbse.net

В магнитоэластических аморфных металлических сплавах  $\lambda_s$  возбуждение магнитоэластических колебаний может осуществляться двумя способами: воздействием на образец переменного магнитного поля  $H_{\sim}$  и воздействием на образец переменных упругих напряжений  $\sigma$ . Вопрос о том, влияет ли способ возбуждения магнитоэластических колебаний в магнитоэластическом ферромагнетике на его магнитоэластические характеристики ранее не рассматривался.

В работе рассматривается аморфный ферромагнетик в виде узкой полоски с осью лёгкого намагничивания, ориентированной перпендикулярно длине образца. Постоянное магнитное поле смещения  $H$  прикладывается вдоль длины образца. В этом же направлении прикладываются  $H_{\sim}$  или  $\sigma$ , возбуждающие в образце магнитоэластические колебания. Сначала рассматривается способ возбуждения переменным магнитным полем. Из модели однородного вращения намагниченности [1] получено соотношение, связывающее величину возникающих упругих напряжений  $\sigma$  со значениями  $H$  и  $H_{\sim}$ .

$$\sigma = \frac{2k}{3\lambda_s} \left[ \frac{H_{\sim}}{H_{\sim} + H} \right], \quad (1)$$

где  $k$  – константа одноосной анизотропии образца,  $\lambda_s$  – константа магнитоэластики. Величина возникающих в образце  $\sigma$  уменьшается с ростом  $H$ . При этом выражение для частоты магнитоэластического резонанса  $f_{r,H_{\sim}}$  может быть записано в виде:

$$f_{r,H_{\sim}} = \frac{1}{2L} \sqrt{\frac{E_0}{\rho}} \left[ \frac{8k^3 H}{8k^3 H + 9E_0 \lambda_s^2 \mu_0^2 M_S^2 (H + H_{\sim})^3} \right]^{1/2}, \quad (2)$$

где  $L$  – длина образца,  $\rho$  – его плотность,  $E_0$  – модуль упругости образца в размагниченном состоянии,  $\mu_0$  – магнитная проницаемость вакуума. Для случая возбуждения магнитоэластических колебаний переменными упругими напряжениями получено следующее соотношение для частоты магнитоэластического резонанса  $f_{r,\sigma}$ :

$$f_{r,\sigma} = \frac{1}{2L} \sqrt{\frac{E_0}{\rho}} \left[ \frac{(2k - 3\lambda_s \sigma)^3}{(2k - 3\lambda_s \sigma)^3 + 9E_0 \lambda_s^2 \mu_0^2 M_S^2 H^2} \right]^{1/2} \quad (3)$$

При  $H < 2k/\mu_0 M_S$  выполняется неравенство  $f_{r,H_{\sim}} < f_{r,\sigma}$ . Экспериментальные результаты исследований по возбуждению магнитоэластических колебаний, выполненные на аморфных металлических лентах составов  $\text{Fe}_{81.5}\text{Si}_{13.5}\text{B}_3\text{C}_2$  и  $\text{Fe}_{64}\text{Co}_{21}\text{B}_{15}$ , прошедших предварительную термомагнитную обработку в широком интервале температур, хорошо согласуются с проведёнными расчётами. Таким образом, способ возбуждения магнитоэластических колебаний оказывает значительное влияние на магнитоэластические свойства высокомагнитоэластических ферромагнетиков с одноосной наведённой анизотропией.

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Грант № 08-08-00210а).*

1. J.D Livingston, Phys. Stat. Sol. (a), 70, 591 (1982)



## ЭФФЕКТЫ ГРАНУЛИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ В МАГНИТНЫХ МУЛЬТИСЛОЯХ $\text{Co}/\text{SiO}_2$

Горьковенко А.Н.<sup>1,\*</sup>, Лепаловский В.Н.<sup>1</sup>, Щёголева Н.Н.<sup>2</sup>, Васьковский В.О.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: gorkovenko@yandex.ru

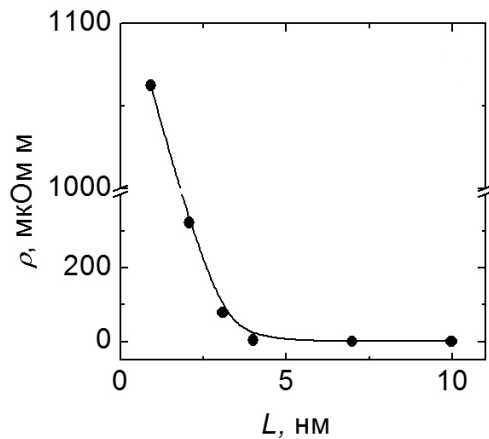


Рис. 1. Удельное электросопротивление плёнок с различным периодом структуры

протiwления выполнялось двузондовым методом. Сведения о микроструктуре получены при помощи просвечивающего электронного микроскопа.

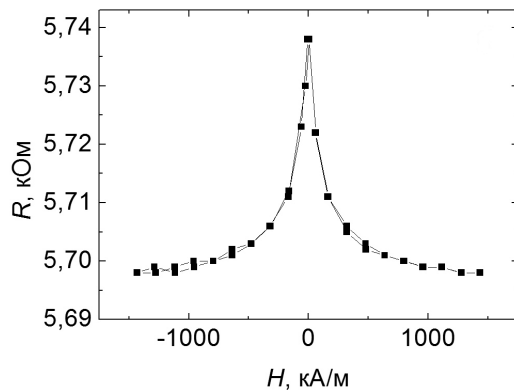


Рис. 2. Магниторезистивная петля плёнки  $[\text{Co}/\text{SiO}_2]_{55}$

Композиционные магнитные среды на основе диэлектрических матриц представляют интерес как носители ряда новых физических явлений, таких как гигантский эффект Холла и гигантское магнитосопротивление, а также рассматриваются как перспективные функциональные материалы [1,2].

В данной работе изучались микроструктура, магнитные и магниторезистивные свойства слоистых плёнок  $[\text{Co}/\text{SiO}_2]_n$ . Объектом исследования была серия образцов, сформированных на кремниевых подложках методом ионного высокочастотного распыления мишеней  $\text{Co}$  и  $\text{SiO}_2$ . Толщина плёнок была фиксированной и составляла 50 нм. Варьируемыми параметрами выступали количество слоёв  $n$  (от 5 до 55) и, соответственно, период структуры  $L$  (от 10 до 1 нм). Магнитные свойства измерялись при помощи SQUID-магнитометра и вибромагнитометра. Измерение магнитосо-

Установлено, что по мере уменьшения периода слоистой структуры наблюдается некоторая трансформация вида петель магнитного гистерезиса, уменьшение остаточной намагниченности, немонокотное изменение коэрцитивной силы, рост удельного электросопротивления (рис. 1). В плёнках  $[\text{Co}/\text{SiO}_2]_n$  обнаружено отрицательное магнитосопротивление (рис. 2), величина которого в поле 18 кЭ составляет 0,7 %. Эти закономерности интерпретированы как признаки перехода микроструктуры плёнок от слоистого к гранулированному состоянию. Это подтверждается результатами электронной микроскопии, полученными в центре электронной микроскопии ИФМ УрО РАН, согласно которым при уменьшении  $L$  происходит измельчение характер-

ных элементов микроструктуры от 10 до 4 нм.

1. A. Gerber, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **310**, 2749 (2007)
2. C. Wang, P. Zhang, L. Zheng, X. Xiao, Y. Rong, Thin Solid Films, **516**, 3422 (2008)

ИЗМЕНЕНИЕ ТОЧКИ КЮРИ В ФЕРРИТАХ РЯДА  $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{--Mg}_2\text{TiO}_4$ 

Губайдуллин Р.Р., Дубов И.Ю.

Стерлитамакская государственная педагогическая академия им. Зайнаб Бишевой, г. Стерлитамак, Россия

E-mail: web.renald@gmail.com

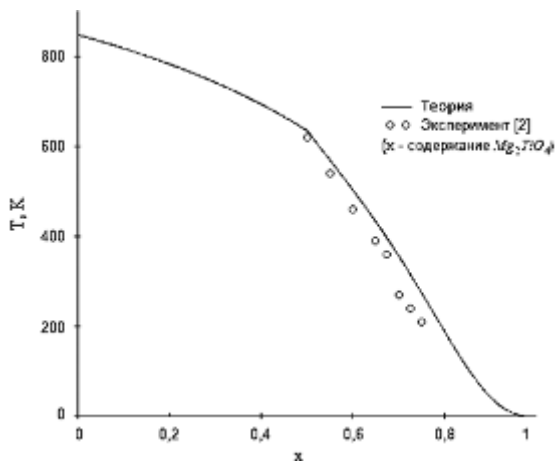
Изменение температуры Кюри ферритмагнитного состава в результате замены магнитных ионов немагнитными можно описать на основе равномерного распределения сверхобменных взаимодействий. По предположению Джиллео[1]: (1) магнитный ион активно участвует в ферритмагнетизме, только если он взаимодействует с двумя или более магнитными ионами другой подрешётки и (2) точка Кюри определена числом полных взаимодействий с активным ионом на одну молекулу.

Для шпинелей с общей формулой  $(\text{Ma}_{1-z}\text{M}_z)(\text{Mb}_{2-y}\text{M}_y)\text{O}_4$ , где Ма и Mb – магнитные ионы в тетраэдрических и октаэдрических позициях и М – немагнитные ионы. Теория Джиллео позволяет определить температуру Кюри, как:

$$T_c(k_o, k_t) = \frac{3}{24} \frac{n(k_o, k_t)}{N(k_o, k_t)} T_c(0, 0),$$

где  $n(k_o, k_t)$  – полный магнитный момент соединения,  $N(k_o, k_t)$  – число активных магнитных ионов,  $k_o, k_t$  – доли магнитных ионов в октаэдрических и тетраэдрических позициях,  $T_c(0, 0)$  – точка Кюри для неразбавленного соединения.

Согласно катионному распределению, описанному в работе [3], для титаномагнетитов ряда  $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{--Mg}_2\text{TiO}_4$ , где замещение будет происходить только в октаэдрических позициях при содержании минерала  $\text{Mg}_2\text{TiO}_4 < 0.5$ , нами было показано изменение температуры Кюри (рис 1).

Рис. 1. Изменение точки Кюри в ферритах ряда  $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{--Mg}_2\text{TiO}_4$ 

Исходным минералом был взят магнетит  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  с температурой Кюри 848 К.

Также произведено сравнение теории с экспериментальными данными работы T.Shimizu [2], в которой были исследованы ферриты  $\text{Mg}_{1+x}\text{Fe}_{2-2x}\text{Ti}_x\text{O}_4$  ( $x=0\text{--}0.5$ ).

1. Gilieo M.A., Journal of Physics and Chemistry of Solids, **13**, 33 (1960)
2. Shimizu T., Asanoa H., Matsua M., Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **310**, 1835 (2007)
3. Кудрявцева Г.П., Гаранин В.К., Жилиева В.А., Трухин В.И., Магнетизм и минералогия природных ферритмагнетиков, МГУ (1982)

**УЧЁТ ВЛИЯНИЯ НЕСОИЗМЕРИМЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР  
НА СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
ОРТОРОМБИЧЕСКИХ МАНГАНИТОВ В РАМКАХ ОБОЛОЧЕЧНОЙ МОДЕЛИ**

*Давыдов А.Ю., Панов Ю.Д.*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ark-davydov@mail.ru

Недавно открытый класс материалов, таких как редкоземельные манганиты TbMnO<sub>3</sub>, DyMnO<sub>3</sub>, и др., привлекает интерес многих исследователей, поскольку в этих соединениях появление электрической поляризации связано с переходом в особое состояние со спиральным магнитным упорядочением [1]. Цель данной работы – учесть влияние такого упорядочения на статические и динамические характеристики системы.

Для случая орторомбического TbMnO<sub>3</sub> (Pnma-симметрии), была рассмотрена простая оболочечная модель с семью параметрами. Межатомный потенциал, включающий в себя дальнедействующее (кулоновское) и ближнедействующее (Борн – Майеровское) взаимодействия, представлен в виде:

$$V_1(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{Z(k)Z(k')}{r} \right] + a \exp \left[ -\frac{br}{R(k) + R(k')} \right], \quad (1)$$

где использовались параметры работы [2]:  $a = 1882$  eV,  $b = 12.364$ ,  $Z(k)$  и  $R(k)$  – эффективные ионный заряд и радиус атома  $k$ . В ходе численного расчёта посредством программного пакета GULP, был получен ряд статических (матрица упругих постоянных) и динамических (полная и парциальные плотности состояний, дисперсионные кривые для фононов) свойств.

Следующим этапом является включение в рассмотрение спиральной магнитной структуры [1]. Была рассмотрена спираль в направлении [010] с периодом в три элементарных ячейки. Спиновое взаимодействие можно учесть добавлением модельного потенциала обменного типа, но с характерным масштабом  $1/r^2$ :

$$V_2(r) = \frac{A(\mathbf{S}_k \times \mathbf{S}_{k'})}{r^2} \quad (2)$$

Где  $S_k$  – спин атома  $k$ ;  $k, k' = \text{Mn}^{3+}$ , постоянная  $A$  выбирается так, чтобы наилучшим образом воспроизвести структуру. Сравниваются результаты расчётов, полученные с включением взаимодействия  $V_2$  и без него.

Детальный анализ симметрии фононных мод  $\Gamma$ -точки для наименее энергичных мод (случай расчёта с взаимодействием  $V_2$ ) представлен в таблице: В ходе анализа полученных данных выяс-

	$\omega, \text{см}^{-1}$	$A_g$	$B_{1g}$	$B_{2g}$	$B_{3g}$	$A_u$	$B_{1u}$	$B_{2u}$	$B_{3u}$
$B_{3u}$	71.6	0	0	0.0003	0.0003	0	0.0003	0	0.9999
$B_{1u}$	76.8	0.0007	0.0004	0	0	0	0.9999	0.0007	0.0008
$A_u$	81.2	0.0011	0.0011	0	0	0.9999	0	0.0011	0

нилось, что введённое нами взаимодействие анизотропным образом влияет на упругие свойства системы, изменяет преимущественно низкоэнергетические состояния (видно из наложения плотностей состояний), а также примешивает к чистым модам, моды иной симметрии (см. таблицу).

1. M. Kenzelmann et al, Phys. Rev. Lett., **95**, 087206 (2005)

2. Renu Choithrani et al., Investigation of phonon dynamics of perovskite multiferroic manganites: RMnO<sub>3</sub> (R=Tb,Dy,Ho), (unpublished)

## ФОРМИРОВАНИЕ МАГНИТНОГО МОМЕНТА В $\alpha$ -Fe

Ефремов А.В., Катанин А.А., Потеряев А.И., Шориков А.О., Скорняков С.Л., Коротин М.А.,  
Анисимов В.И.

Институт физики металлов РАН, г. Екатеринбург, Россия  
E-mail: andrey@avegen.com

Влияние магнетизма на свойства материалов привлекает внимание исследователей с древних времен. В особенности проблема формирования ферромагнетизма в железе вызывает огромный интерес учёных на протяжении многих столетий.

Итинерантная теория магнетизма переходных металлов была впервые предложена Стонером и в следствии стала основой для спин-флуктуационной теории Мории [1], которая описывала слабые ферромагнитные и антиферромагнитные материалы. Согласно этой теории можно описать поведение магнитной восприимчивости близкое к Кюри-Вейссу и температуру перехода. В тоже самое время, теория Стонера переоценивает величину  $T_C$  и при  $T > T_C$  не описывает величину магнитного момента. Теория Мории тоже переоценивает величину  $T_C$  и величина  $T_C$  выше температуры структурного перехода.

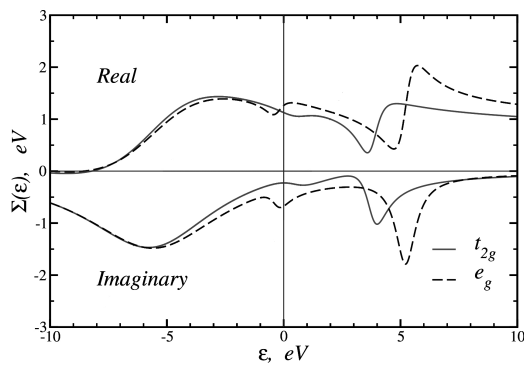


Рис. 1. Собственная энергия для  $t_{2g}$  (сплошная линия) и  $e_g$  (пунктирная линия) состояний

Для описания магнитного момента в железе мы использовали комбинацию первопринципного расчёта [2] (LDA) и модельного подхода [3] (DMFT), что позволило нам корректно описать не только магнитный момент выше  $T_C$ , но и магнитную восприимчивость как функцию температуры.

Расчёты в LDA+DMFT [4] приближении для парамагнитной фазы железа показали, что кулоновское взаимодействие ответственно за формирование локального момента  $e_g$  электронов, это видно из поведения собственной энергии на реальной оси (Рис. 1). Эти особенности соответствуют не Ферми-жидкостному поведению  $e_g$  электронов. Исследовав орбитальные вклады в закон Кюри-Вейсса, при Хундовском обмене  $I = 0.9$  eV, мы определили величину локального магнитного момента

$e_g$  электронов  $p_{CW} = 0.52 \mu_B$ . По результатам расчёта предложена модель [5] типа Шубина-Вонсовского, объясняющая магнитные свойства  $\alpha$ -Fe.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ-07-02-00041-ф, РФФИ-10-02-00046-а.

1. T. Moriya, Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism, Springer-Verlang, Berlin (1985)
2. M.F. Manning, Phys. Rev., **63**, 190 (1943); J. Callaway, Phys. Rev., **99**, 500 (1955); E. Abate and M. Asdente, Phys. Rev., **140**, A1303 (1965)
3. M. Ulmke, Eur. Phys. J. B, **1**, 301 (1998); T. Obermeier, T. Pruschke, and J. Keller, Phys. Rev. B, **56**, R8479 (1997); J. Wahle, N. Blümer, J. Schliphf, K. Held, and D. Vollhardt, ibid. **58**, 12749 (1998)
4. A.I. Lichtenstein, M.I. Katsnelson, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett., **87**, 067205 (2001)
5. A.A. Kataniin, A.I. Poteryaev, A.V. Efremov, A.O. Shorikov, S.L. Skorniyakov, M.A. Korotin, and V.I. Anisimov, Phys. Rev. B, **81**, 045117 (2010)

## ЭФФЕКТ ФРЕДЕРИКСА В ПЛАНАРНЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ ПРИ СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАДУСЛОВИЯХ

*Еникеев Ю.А.\*, Мигранов Н.Г.*

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

\*E-mail: cezar2god@mail.ru

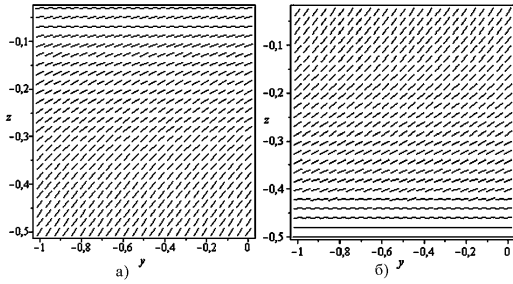


Рис. 1.

предполагается, возникают деформации только продольного и поперечного изгиба [2, с. 81], которые находятся в плоскости, обозначаемой  $(xz)$ . Угол, между директором нематика и осью  $z$ , так называемый угол наклона, обозначен как  $\varphi$ . В одномерной постановке задачи  $\varphi = \varphi(z)$ . В одноконстантном приближении  $\varphi(z)$  есть решение дифференциального уравнения [3].

$$k \frac{d^2 \varphi}{dz^2} + \frac{1}{2} \chi_a H^2 \sin(2\varphi) = 0, \quad (1)$$

удовлетворяющего граничному условию [4]

$$\left( -k \frac{d\varphi}{dz} + \frac{1}{2} \omega \sin(2\varphi) \right) \Big|_{z=-d/2} = 0. \quad (2)$$

Данная работа посвящена рассмотрению искажения структуры директора во внешнем магнитном поле при двух крайних случаях: предельно слабого (решение (3), рис. 1 а) и бесконечно сильного (решение (4), рис.1 б) сцепления директора НЖК с поверхностью ячейки.

$$\varphi = \frac{\pi}{2} - 2 \operatorname{arctg} \left( \exp \left( \sqrt{\frac{\chi_a}{k}} \cdot H \cdot z \right) \right) \quad (3)$$

$$\varphi = \frac{\pi}{2} - 2 \operatorname{arctg} \left( \exp \left( \sqrt{\frac{\chi_a}{k}} \cdot H \cdot \left( z + \frac{d}{2} \right) \right) \right) \quad (4)$$

Полученные решения позволяют описать возникающие деформации в нематике, их зависимость от внешних и внутренних параметров, а также могут быть использованы для моделирования исчезновения деформаций при выключении внешнего поля.

1. Barbero G., Pandolfi L., Surface viscosity in nematic liquid crystals, *Physical Review E*, **79**, 051701 (2009)
2. Поль де Жен, под ред. Сониной А.С., *Физика жидких кристаллов*, Москва (1977)
3. Еникеев Ю. А., Мигранов Н.Г., Влияние параметров нематического жидкого кристалла на искажение структуры директора во внешних электрических полях // *Материалы V(XXXVII) Международной научно-практической конференции / Кемеровский госуниверситет, – Кемерово: ООО «ИНТ» (2010) – Вып. 11. – Т. 2. – с. 511*
4. Rapini A. and Papoular M., *J.Phys.\_Paris\_, Colloq.* **30**, C4-54\_1969

**ЭФФЕКТ ПОДАВЛЕНИЯ КРИПА МАГНИТНОГО ПОТОКА В СВЕРХПРОВОДНИКЕ,  
ПОМЕЩЁННОМ ВБЛИЗИ ФЕРРОМАГНЕТИКА***Захаров М.С.*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: zahher@yandex.ru

Термически активированный крип магнитного потока, или магнитная релаксация, в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) широко исследуется в настоящее время. Крип потока возникает, когда в сверхпроводнике устанавливается критическое состояние, т.е. появляется градиент плотности вихрей, или градиент индукции, обусловленный пиннингом вихрей. Этот градиент определяет плотность сверхтока в образце (речь идёт только об экранирующих токах, наводимых в сверхпроводнике при изменении внешнего магнитного поля). При протекании тока на вихри действует сила Лоренца, которая уменьшает потенциальный барьер, преодолеваемый вихрями вследствие термических флуктуаций, и вызывает диффузию вихрей из области с более высокой плотностью вихрей в область с меньшей плотностью.

ВТСП материалы характеризуются «гигантским» крипом магнитного потока [1]. Сильная магнитная релаксация приводит к уменьшению градиента плотности потока и уменьшению объёмной плотности экранирующих сверхтоков. Это ограничивает потенциальное применение данных материалов в промышленности.

В нашем Институте теплофизики УрО РАН обнаружен эффект подавления магнитной релаксации в ВТСП при сближении сверхпроводника, испытывающего магнитную релаксацию, с ферромагнетиком [2,3].

В экспериментах использовался дисковый образец (диаметр 20 мм, высота 8.5 мм) из текстурированной керамики YBaCuO. Температура перехода в сверхпроводящее состояние  $T_C = 91$  К, ширина перехода 1 К. Для регистрации нормальной к плоскости диска компоненты магнитного поля (локальной индукции) использовались датчики Холла с чувствительной зоной  $1.5 \times 0.5$  мм. Датчики размещались на плоской поверхности диска. Внешнее однородное магнитное поле с индукцией  $B_e$  создавалось электромагнитом (ширина намагнитного зазора 10 мм, диаметр ферромагнитных полюсных наконечников 40 мм). Использовался режим намагничивания field-cooled: ВТСП-образец, имеющий температуру выше  $T_C$ , помещали в зазор электромагнита с полем  $B_e = 0.9$  Тл, охлаждали образец до 77 К, выключали внешнее поле и удаляли образец из зазора электромагнита. При этом образец намагничивался, т.е. захватывал магнитный поток. Локальная индукция  $B$  измерялась в зависимости от времени.

Намагниченный образец в этом положении (вне ферромагнетика) испытывает сильную магнитную релаксацию, т.е. наблюдается уменьшение локальной индукции со временем. Эффект подавления крипа заключается в следующем. При возвращении образца обратно в зазор выключенного электромагнита крип прекращается. Распределение локальной индукции по образцу в этом случае не изменяется в течение продолжительного времени.

Данный эффект объясняется тем, что ферромагнетик, намагничиваясь в магнитном поле сверхпроводника, индуцирует в образце токи, циркулирующие в противоположном направлении по сравнению с током захвата. В результате устойчивость магнитной структуры к крипу возрастает, так как на разные участки вихрей могут действовать встречные силы Лоренца.

---

1. Yeshurun Y., Malozemoff A.P., Shaulov A., Rev. Mod. Phys., **68**, 911-949 (1996)

2. Смоляк Б.М., Ермаков Г.В., Письма в ЖТФ, **36**, 10, 39-44 (2010)

3. Smolyak B.M., Ermakov G.V., Physica C, **470**, 218-220 (2010)

## ВЛИЯНИЕ ПРОСЛОЙКИ Ti НА МАГНИТНЫЕ И МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ ПЛЁНОК Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub>/Tb-Co

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

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: kuleshnik@list.ru

В работе представлены результаты исследования влияния толщины прослойки Ti на свойства обменносвязанной слоистой структуры Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub>/Tb<sub>35</sub>Co<sub>65</sub>. Такие плёнки могут быть использованы в качестве сред для магнитных сенсоров, в которых слой Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub> обеспечивает наличие эффекта анизотропного магнитосопротивления, а слой Tb<sub>35</sub>Co<sub>65</sub> создаёт магнитное смещение в слое пермаллоя [1], необходимое для линеаризации отклика электрического сопротивления системы на внешнее магнитное поле. Введение немагнитной прослойки Ti рассматривается как один из способов регулирования интенсивности обменного взаимодействия между магнитными слоями, которое определяет чувствительность магниторезистивной среды к магнитному полю.

Образцы были получены методом ионного распыления на стеклянных подложках в присутствии технологического магнитного поля напряжённостью 170 Э. Слоистая структура Fe<sub>19</sub>Ni<sub>81</sub> (50 нм)/Ti(L<sub>Ti</sub>)/Tb<sub>35</sub>Co<sub>65</sub> (110 нм)/Ti (11 нм) формировалась в едином вакуумном цикле путём последовательного распыления мишеней различного состава. Магнитные свойства плёнок измерялись с помощью вибрационного магнитометра при комнатной температуре, а так же с помощью СКВИД магнитометра в диапазоне температур от 5 до 350 К. Электросопротивление измерялось по стандартной четырёхзондовой методике на образцах в форме полос.

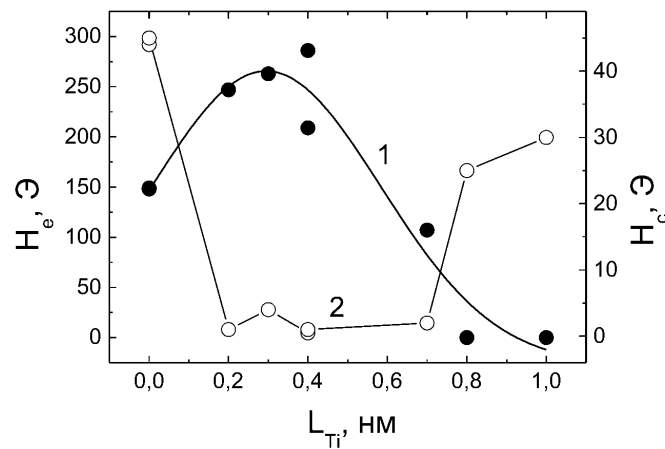


Рис. 1. Зависимости поля смещения  $H_e$  (кривая 1) и коэрцитивной силы  $H_c$  (кривая 2) слоя пермаллоя от толщины прослойки титана  $L_{Ti}$  в двухслойной структуре

На рисунке 1 показаны зависимости поля смещения  $H_e$  и коэрцитивной силы  $H_c$  от толщины  $L$  немагнитной прослойки Ti. Немонотонный характер этих зависимостей связывается с особенностями микроструктуры межслойного интерфейса и дисперсией магнитной анизотропии слоя Tb<sub>35</sub>Co<sub>65</sub>. Показано, что исследованные плёночные структуры обладают анизотропией магнитосопротивления, на величину которой существенное влияние оказывает толщина немагнитной прослойки.

Работа выполнена по проекту РФФИ-офи-р № 08-02-99063

1. William C. Cain, Mark H. Kryder, J. Appl. Phys., **67**, 5722 (1990)

**ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА СЛОЯ ПЕРМАЛЛОЯ  
НА МАГНИТНЫЕ И МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫЕ СВОЙСТВА  
ПЛЁНОК  $\text{Fe}_{19}\text{Ni}_{81}/\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$**

*Маюра Н.С.\*, Кулеш Н.А., Балымов К.Г., Васьковский В.О.*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: brothers\_mayurs@mail.ru

В рамках решения задачи по созданию магниторезистивной среды с внутренним магнитным смещением исследовалось влияние селективного вакуумного отжига слоя пермаллоя на закономерности перемагничивания и анизотропию магнитосопротивления двухслойных обменно-связанных плёнок  $\text{Fe}_{19}\text{Ni}_{81}/\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$ . Образцы для исследования получались методом высокочастотного распыления мишеней различного состава по следующей процедуре. Непосредственно на подложку  $\text{SiO}_2$  осаждался слой пермаллоя толщиной 40 нм. Затем он отжигался в течение 1 часа при температуре  $T_{\text{отж}}$ , которая варьировалась в пределах 250–450 °С. После охлаждения первого слоя на него наносился второй слой состава  $\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$ , толщиной 100 нм, и вся плёночная структура покрывалась защитным слоем  $\text{Ti}$  толщиной 10 нм.

Известно [1], что аморфные ферромагнитные плёнки обладают высокой коэрцитивной силой и могут создавать в смежных магнитомягких слоях однонаправленную анизотропию, характеризующуюся полем обменной связи  $H_e$ . Оказалось, что это поле, осуществляющее эффективное подмагничивание магнитомягкого слоя, существенно повышается при отжиге (кривая 1, на рис.1), а коэрцитивная сила  $H_c$  слоя пермаллоя падает (кривая 2, на рис.1).

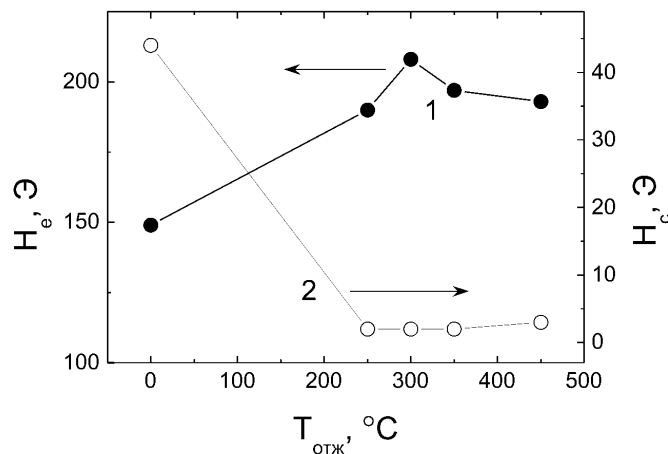


Рис. 1. Зависимости поля обменной связи  $H_e$  (кривая 1) и коэрцитивной силы  $H_c$  (кривая 2) от температуры отжига  $T_{\text{отж}}$  для образцов  $\text{Fe}_{19}\text{Ni}_{81}/\text{Tb}_{35}\text{Co}_{65}$

В работе дана качественная интерпретация наблюдающихся закономерностей в изменении  $H_e$  и  $H_c$ . Кроме того показано, что термообработка ведет к росту анизотропии магнитосопротивления от 0.4 до 2%.

*Работа выполнена по проекту РФФИ-офи-р № 08-02-99063*

1. Балымов К.Г., Васьковский В.О., Свалов А.В., Степанова Е.А., Кулеш Н.А., ФММ, т. 110, № 6, (2010)



**МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ  $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$** *Меренцов А.И.<sup>1,2\*</sup>, Волегов А.С.<sup>1</sup>, Вешкурова К.А.<sup>1</sup>*<sup>1</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Alexander.Merentsov@usu.ru

Твёрдые растворы замещения с общей формулой  $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{X}_2$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) представляют интерес в связи с возможной спиновой поляризацией носителей заряда [1]. В исследуемых соединениях впервые осуществлено акцепторное легирование дихалькогенидов титана. В работах [2,3] показано, что с увеличением концентрации хрома происходит перестройка структуры от  $\text{TiSe}_2$  к  $\text{CrSe}_2$ .

В настоящей работе четырёхзондовым методом проведено измерение температурной зависимости сопротивления поликристаллических образцов  $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$  в интервале температур 77 – 300 К. Измерение магнитных свойств проводилось на SQUID-магнитометре в интервале температур 2 – 300 К и интервале магнитных полей 0 – 70 кЭ.

Полученные на поликристаллических образцах кривые совпадают с полученными ранее данными на монокристаллах [2]. Увеличение концентрации хрома приводит к металлизации соединений, что объясняется увеличением концентрации носителей (дырок). Магнитные измерения показывают, что увеличение концентрации хрома приводит к появлению магнитного порядка. Начиная с состава  $\text{Cr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{Se}_2$  появляются различия на ходе зависимостей магнитного момента от температуры при охлаждении образца в поле и без поля (ZFC и FC кривые), что говорит о переходе в состояние спинового стекла при низких температурах. Величина эффективного магнитного момента увеличивается с ростом концентрации хрома и в максимуме составляет  $3.55\mu_B$  для концентрации хрома 0.25, что несколько выше, чем в интеркалированных соединениях  $\text{Cr}_x\text{TiSe}_2$  ( $3.2\mu_B$  [4]). Подобное различие связывается с отсутствием гибридизации  $d$  орбиталей хрома и титана в случае с замещением и с наличием гибридизации в случае интеркаляции. Материал с высокой концентрацией хрома ( $\text{Cr}_{0.83}\text{Ti}_{0.17}\text{Se}_2$ ) представляет собой мягкий ферромагнетик с коэрцитивной силой порядка 0.2 Э.

*Работа выполнена при финансовой поддержке: РФФИ Грант № 09-03-0053-а, РФФИ Грант № 09-08-00073-а, программа Минобрнауки РНП.2.1.1.1682*

1. J.Dijkstra, C.F. van Bruggen, C. Haas and R.A. de Groot, Phys. Rev. B, **40**, 7973 (1989)
2. А.Н. Титов, А.И. Меренцов, В.Н. Неверов, ФТТ, **48**, 1390 (2006)
3. A.I. Merentsov, Yu.M. Yarmoshenko, N.A. Skorikov, A.N. Titov, A. Buling, M. Räkera, M. Neumann, E.G. Galieva and P.A. Slepudin, J. Electr. Spec. Rel. Phen., DOI 10.1016/j.elspec.2010.07.005
4. А.В. Куранов, В.Г. Плещёв, А.Н. Титов, Н.В. Баранов, Л.С. Красавин, ФТТ, **42**, 2029 (2000)

**МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА  
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА  $\text{Nd}_9\text{Fe}_{74}\text{B}_{12}\text{Ti}_4\text{C}$**

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

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Neznakhin88@mail.ru

В последние десятилетия активно проводятся исследования нанокomпозиционных быстрозакалённых магнитотвёрдых материалов, вследствие уникальных магнитных свойств, которыми они обладают.

В настоящей работе проведено исследование магнитных свойств и морфологической структуры наноструктурированного сплава  $\text{Nd}_9\text{Fe}_{74}\text{B}_{12}\text{Ti}_4\text{C}$ , полученного спинингованием расплава входящих в его состав химических элементов (с пропуском электрического тока через струю расплава и без него) и последующих кратковременных отжигов. Указанный сплав является модификацией трёхкомпонентных сплавов системы Nd-Fe-B, наноструктурное состояние в которых, вследствие особенностей диаграммы состояния, технически сложно сформировать металлургическими приёмами обработки.

Преимуществом исследуемого сплава по сравнению с тройными сплавами системы Nd-Fe-B является возможность почти полной его аморфизации в результате спинингования, что позволяет использовать дополнительные термические обработки, реализовывать наноструктурное состояние с высокими магнитотвёрдыми свойствами.

Установлен факт влияния тока, пропускаемого через струю расплава в процессе получения ленты, на скорость охлаждения сплава.

Установлена температура Кюри рентгеноаморфного сплава  $\text{Nd}_9\text{Fe}_{74}\text{B}_{12}\text{Ti}_4\text{C}$  и фазы  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ , с входящими в её состав Ti и C.

Определены параметры кристаллической решётки фазы  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ , с входящими в её состав Ti и C.

Впервые выявлены столбчатые образования в области контактной поверхности быстрозакалённого сплава, синтезированного с пропуском тока через струю расплава в процессе спинингования.

Установлено наличие незначительной магнитной текстуры зёрен фазы  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  в низкоэнергетическом состоянии после отжигов.

МАГНИТНЫЕ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  $\text{La}_{0.7}\text{Ba}_x\text{Ca}_{0.3-x}\text{MnO}_3$ Павлухина О.О.\*

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

\*E-mail: pavluhinaoo@chelcom.ru

В последнее время наблюдается устойчивый интерес исследователей к материалам на основе  $\text{LaMnO}_3$ , у которых выявлен значительный магнитокалорический эффект (МКЭ) [1]. МКЭ характеризуется изотермическим изменением энтропии и адиабатическим изменением температуры при изменении магнитного поля. Это свойство открывает возможность применения материалов, у которых наблюдается МКЭ, при создании охлаждающих устройств на основе твердотельных хладагентов [2]. Работ, посвящённых исследованию манганитов различного состава и МКЭ в них довольно много, однако практически отсутствует информация об адиабатическом измерении прямым методом температуры при изменении магнитного поля, которая была получена в ходе данного эксперимента.

Поликристаллические образцы  $\text{La}_{0.7}\text{Ba}_x\text{Ca}_{0.3-x}\text{MnO}_3$  ( $x = 0.3, 0.24, 0.12$ ) получены методом твердофазного синтеза. Точки фазовых переходов определялись по температурным зависимостям низкополевой намагниченности, полученных с помощью оригинального магнитометра, работающего на основе эффекта Холла. Магнитокалорический эффект исследовался на установке для измерения прямым методом адиабатического изменения температуры, индуцируемого изменением магнитного поля фирмы AM&TC (Россия). В данной установке термопара фиксируется между двумя частями образца. Источник магнитного поля на постоянных магнитах создаёт синусоидально изменяющееся (от 0 до 2 Тл) магнитное поле, действующее на образец, помещённый в вакуумированную измерительную вставку. Магнитное поле измеряется с помощью датчика Холла. Управляющий компьютер производит запись величин  $dT$  и  $H$ , изменяющихся во время процесса измерения.

В Таблице 1 отображен фазовый состав и температура Кюри манганитов. Из представленных данных видно, что температура Кюри с увеличением содержания Ва увеличивается и достигает 321 К для  $\text{La}_{0.7}\text{Ba}_{0.3}\text{MnO}_3$ .

Таблица 1. Фазовый состав, температура Кюри и  $dT_{\text{ад}}$  в поле 2 Тл

Образец	$T_C$ , К	$dT_{\text{ад}}$ , К
$\text{La}_{0.7}\text{Ba}_{0.3}\text{MnO}_3$	321	0.8
$\text{La}_{0.7}\text{Ba}_{0.24}\text{Ca}_{0.06}\text{MnO}_3$	305	0.72
$\text{La}_{0.7}\text{Ba}_{0.12}\text{Ca}_{0.18}\text{MnO}_3$	267	—

Были исследованы температурные зависимости МКЭ для  $\text{La}_{0.7}\text{Ba}_{0.3}\text{MnO}_3$  и  $\text{La}_{0.7}\text{Ba}_{0.24}\text{Ca}_{0.06}\text{MnO}_3$  в магнитном поле от 0 до 2 Тл. Установлено, что для представленных манганитов наблюдается положительный МКЭ. Максимальное значение  $dT_{\text{ад}}$  составляет 0.8 К и наблюдается при температуре 321 К для  $\text{La}_{0.7}\text{Ba}_{0.3}\text{MnO}_3$ .

В ходе данной работы синтезированы манганиты  $\text{La}_{0.7}\text{Ba}_x\text{Ca}_{0.3-x}\text{MnO}_3$ , прямым методом исследованы адиабатические изменения температуры при изменении магнитного поля. Максимальные значения МКЭ в манганитах  $\text{La}_{0.7}\text{Ba}_{0.24}\text{Ca}_{0.06}\text{MnO}_3$  наблюдаются вблизи комнатных температур, что позволяет рассматривать данные соединения как альтернативные для создания магнитных холодильников.

1. M. Phan, S.Yu, J. Magn. Magn. Mater., **308**, 325 (2007)
2. V.K. Pecharsky, K.A. Gschneidner, J. Magn. Magn. Mater., **200**, 44 (1999)

СПИН-ВОЛНОВАЯ ДИНАМИКА ИНВАРНОГО СПЛАВА  $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$ 

Пиядов В.В.<sup>1\*</sup>, Григорьев С.В.<sup>1</sup>, Витошнев В.В.<sup>1</sup>, Дядькин В.А.<sup>1</sup>, Мензель Д.<sup>2</sup>, Эккерлебе Х.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Петербургский институт ядерной физики РАН, г. Гатчина, Россия

<sup>2</sup>Techinsche Universitat Braunschweig, Braunschweig, Germany

<sup>3</sup>GKSS Forschungszentrum, Geesthacht, Germany

\*E-mail: piyadov@lns.pnpi.spb.ru

В данном докладе представлены результаты исследования спин-волновой динамики классического инварного сплава  $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$ . Исследования проводились методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов при наклонной геометрии магнитного поля в широком температурном диапазоне  $T < T_C$ . Метод основан на анализе лево-правой асимметрии в магнитном рассеянии поляризованных нейтронов, возникающей в случае, когда направление намагниченности в образце наклонено по отношению к волновому вектору падающего пучка. Спин-волновое рассеяние сконцентрировано в основном вблизи критического угла  $\theta_C$ , который зависит от магнитного поля как:  $\theta_C^2(H) = \theta_0^2 - (\Delta + g\mu H)\theta_0/E_n$ , где  $\Delta$  – щель в спектре спиновых волн, и  $\theta_0 = \hbar^2 \frac{1}{2Dm_n}$ , где  $D$  – жёсткость спиновой волны, а  $E_n$  и  $m_n$  – энергия и масса нейтрона.

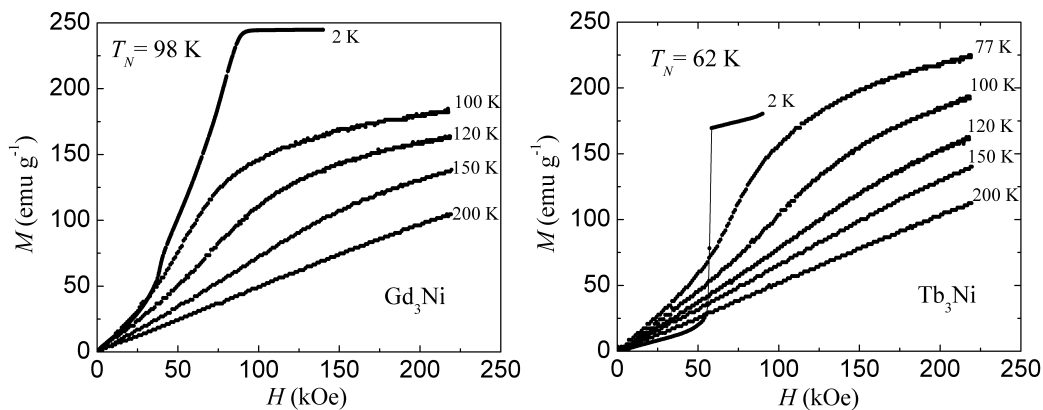
В окрестности критического угла, рассеяние размыто спин-волновым затуханием  $\Gamma(q)$ . Параметры спиновой волны, такие как жёсткость спиновой волны  $D$ , и затухание  $\Gamma$ , были получены сравнением антисимметричного вклада в рассеяние с модельной функцией. Температурная зависимость жёсткости  $D$  хорошо описывается выражением:  $D = D_0|\tau|^x$ , где  $\tau = 1 - \frac{T}{T_C}$ ,  $x = 0.47 \pm 0.01$  и  $D_0 = 137 \text{ meV}\text{\AA}^2$  для всего диапазона температур  $|\tau| > 0.1$ .

*Работа выполнена в рамках Федеральной научно-технической программы (ГК 02.740.11.0874) и частично за счет РФФИ проекта 09-02-01023-а.*

КОРРЕЛЯЦИИ БЛИЖНЕГО МАГНИТНОГО ПОРЯДКА В СОЕДИНЕНИЯХ  $R_3Ni$ Прошкин А.В.<sup>1,2\*</sup>, Баранов Н.В.<sup>1,2</sup>, Губкин А.Ф.<sup>1</sup>, Герасимов Е.Г.<sup>1</sup><sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: ProshkinAV@mail.ru

При температуре магнитного фазового перехода ( $T_N$ ) трёхмерных ферро-, антиферромагнетиков не происходит полного разупорядочения магнитных моментов. Ближний магнитный порядок остаётся до температур  $T \sim 1.1-1.2T_N$ . В соединениях, в которых магнитная структура является двумерной, корреляции ближнего магнитного порядка могут существовать до температур в несколько раз превышающих  $T_N$  (например, в манганитах [1]).

Рис. 1. Кривые намагничивания соединений  $Gd_3Ni$  (слева) и  $Tb_3Ni$  (справа) в импульсных полях при различных температурах

В данной работе нами были проведены измерения теплоёмкости, электросопротивления, намагниченности соединений  $R_3Ni$  ( $R = Gd, Tb$ ), а также проведены нейтронографические исследования для соединения  $Tb_3Ni$ . В результате анализа проведённых экспериментов было установлено, что магнитная часть энтропии в точке  $T_N$  соединений  $R_3Ni$  достигает только 60 % от максимального теоретического значения. Кривые намагничивания, измеренные в импульсных полях, при  $T > T_N$  проявляют поведение не характерное для парамагнитных веществ (рис.1) вплоть до температур в несколько раз превышающих  $T_N$ . Согласно нейтронографическим исследованиям соединения  $Tb_3Ni$  в области малых углов наблюдается диффузный пик, который существует вплоть до 300 K. По нашему мнению, все перечисленные экспериментальные факты указывают на существование корреляций ближнего магнитного порядка до температур, превышающих  $T_N$  в 4–5 раз. Вероятная причина существования ближнего магнитного порядка в широкой области температур выше  $T_N$  в соединении  $Gd_3Ni$  и  $Tb_3Ni$ , на наш взгляд, кроется в том, что структура этого соединения носит слоистый характер. Слои атомов R разделены атомами переходного металла. Такая структура предполагает возможное различие в энергии обменного взаимодействия между  $4f$  электронами ионов R, расположенных в одном слое, и энергии R-R обменного взаимодействия между слоями с участием  $3d$  электронов Ni.

1. Argyriou D. N. et al., J. Appl. Phys., **83**, 6374 (1998)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТООПТИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ,  
СОЗДАВАЕМЫХ МАГНИТНЫМИ ДИПОЛЯМИ  
В ПЛЁНКАХ С ПЛОСКОСТНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ**

*Сабирьянова Э.А.\*, Иванов В.Е.*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Elina-sab@mail.ru

В работе проведено моделирование магнитооптических изображений, создаваемых магнитными диполями в плёнках с плоскостной анизотропией. Моделирование яркости магнитооптических (МО) изображений проведено при учёте координатного распределения намагниченности  $J_s(x)$  (магнитной структуры) в индикаторной плёнке, в предположении аддитивности вкладов от меридионального и полярного МО-эффектов [1]. Считалось, что яркость изображения линейно зависит от компонент намагниченности и магнитооптических параметров материала [2]. Также считалось, что индикаторная плёнка не имеет анизотропии в плоскости.

Моделирование магнитного поля и соответствующих магнитооптических картин в меридиональной чувствительности, создаваемых простыми конфигурациями диполей показало, что один диполь, ориентированный перпендикулярно поверхности индикаторной плёнки, создаёт легко расшифровываемую магнитооптическую картину с одной особой точкой непосредственно над диполем. Эта особая точка характеризуется быстрым изменением величины и направления намагниченности в её окрестности. Также показано, что вклад от полярного эффекта незначительно влияет на формирование МО-изображений, по сравнению с вкладом от меридионального эффекта. Проанализировано влияние расстояния между индикаторной плёнкой и источником магнитного поля, а также внешнего магнитного поля.

Диполь, параллельный плоскости наблюдения, формирует две особые точки. Наличие особых точек связано с пересечением линий равных напряжённостей, на которых компоненты  $H_x, H_y$  равны нулю. При включении внешнего однородного поля возникают новые особые точки (точки равной напряжённости). В этих точках суммарное поле равно нулю:  $H_R = 0$ , или покомпонентно:  $H_{nx} = H_{0x}, H_{ny} = H_{0y}$ . При увеличении внешнего поля точки равной напряжённости приближаются к источнику магнитного поля.

Системы из двух диполей создают МО-изображения, имеющие сложный и трудно расшифровываемый рисунок. Распределение яркости удаётся расшифровать путем сравнения МО-изображений с рассчитанными топограммами поля (конфигурации линии равной напряжённости). Число особых точек и их местоположение определяется числом и координатами пересечения линий равной напряжённости  $H_x = 0, H_y = 0$ .

Включение внешнего поля в плоскости индикаторной плёнки приводит к тому, что в больших полях МО-изображение распадается на два простых, каждое из которых показывает независимое поведение изображения магнитного диполя из системы.

*Работа выполнена при поддержке гранта 08-02-99081-р\_офи.*

1. В.Е. Иванов, Письма в ЖТФ, **35**, 9, (2009)
2. Червинский М.М., Глаголев С.Ф., Горбунов И.П. Магнитооптические методы и средства определения магнитных характеристик материалов. Л.: «Энергия», (1980)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОСТОЯННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ СРЕДНЕЙ СИЛЫ  
НА ВОДНУЮ КИСЛОТНО-ЩЕЛОЧНУЮ РЕАКЦИЮ  
ОСАЖДЕНИЯ ПОРОШКА МАГНЕТИТА

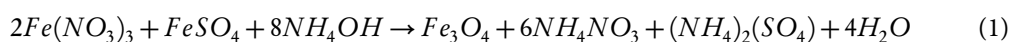
*Смирнов И.А., Журавский Д.В., Бриков Е.С.\**

Тюменский государственный университет, г. Тюмень, Россия

\*E-mail: brikov\_niep@mail.ru

Продолжительное время вызывают интерес методики получения частиц с заданной формой и магнитными свойствами [1-3]. Актуальной остаётся проблема взаимосвязи формы и магнитных свойств зёрен порошка магнетита.

Химический способ является самым доступным способом синтеза мелкоразмерных магнитных частиц. В исследованиях мы использовали водную кислотно-щелочную (с избытком щёлочи) 2-х стадийную реакцию осаждения  $Fe_3O_4$ :



Были получены порошки с воздействием на реакцию (1) постоянными магнитными полями напряжённостью  $H$ :  $5940 \pm 49$  Э,  $4070 \pm 44$  Э,  $0$  Э. Осадок промывался дистиллированной водой до pH 8-9, выпаривался при  $80 \div 90^\circ C$ . Далее проводились съёмки XRD в  $CuK_\alpha$  на ДРОН 7 и исследования осадка методами атомной силовой (AFM) и магнитной силовой микроскопии (MFM) на зондовом микроскопе Ntegra Aura.

Установлены объёмы выхода магнетита в соответствии с воздействием магнитного поля  $H$  (см. выше): 0.5:0.75:1 (в долях объёма порошка, при  $H = 0$ ). Уменьшение объёма объясняется воздействием магнитного поля на кинетику радикальной реакции и осаждения, а также на механизм сверхтонкого взаимодействия спинов в радикалах и атомах. Методом XRD анализа установлен фазовый состав порошков –  $Fe_3O_4$ . Выявлено, что на дифрактограммах при  $20^\circ < 2\theta < 33^\circ$  присутствует сильный диффузный фон, интенсивность которого увеличивается с 130 до 168 с ростом  $H$  поля. Также присутствует картина изменения дифракционных пиков при разных  $H$ , так при  $H = 5940 \pm 49$  Э структурные пики исчезают, что подтверждает гипотезу о разрушении дальнего кристаллического порядка и появления анизотропных форм частиц в процессе осаждения.

Для исследования методами AFM и MFM порошки в спиртовой суспензии обрабатывались в ультразвуковой ванне, наносилась на слюдяную подложку и высушивались при нормальных условиях в течение суток. По изображениям AFM выявлены закономерности изменения распределений формы частиц с увеличением магнитного поля: форма частиц всё сильнее напоминают диски с уменьшением дисперсности  $\sigma$  ( $h = 6$  nm,  $D_{cp} = 69.8$  nm,  $\sigma = 4.3$  nm при  $H = 5940 \pm 49$  Э), что можно объяснить существенной зависимостью коэрцитивной силы конденсированной фазы от размера и формы частицы, а также влиянием магнитного поля на кинетику осаждения сольватированных продуктов реакции. По данным MFM фазы колебаний выявлена на частицах всех порошков однодоменная структура без доменных стенок и магнитного порядка.

Полученные экспериментальные данные и их термомагнитные кинетические объяснения находятся в соответствии с результатами исследований  $Fe_3O_4$  в реакциях с хлорным железом методами ТЕМ и SEM группы Vereda F. [3].

1. Вонсовский С.В., Магнетизм, Наука (1971)
2. Губин С.П., Кокшаров Ю.А., Хомутов Г.Б., Юрков Г.Ю., Успехи химии, 74 (6), 539 (2005)
3. Vereda F., de Vicente J., Hidalgo-Alvarez R., Langmuir, 23, 3581 (2007)

## МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В НИТЕВИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ АЗИДА СЕРЕБРА

*Удовиченко Е.В., Демко В.П.*

Кемеровский государственный университет, г. Кемерово, Россия

\*E-mail: specproc@kemsu.ru

Ранее было обнаружено разложение кристаллов азидов серебра в постоянном магнитном поле, фиксируемое по выделению газообразных продуктов разложения [1]. Для объяснения данного эффекта было сделано предложение о наличии магнитоэлектрического эффекта в данных материалах.

Целью настоящей работы является экспериментальное исследование особенностей проявления обратного магнитоэлектрического эффекта в кристаллах азидов серебра.

В качестве объектов исследования были выбраны нитевидные кристаллы азидов серебра со средними размерами  $10 \times 0.1 \times 0.03$  мм.

Экспериментально показано, что разложение кристаллов азидов серебра по внешнему газовыделению (во время действия магнитного поля фиксируется скорость выделения пузырьков газа в масло, покрывающее кристалл [2]) наблюдается в широкой области значений напряжённостей магнитного поля от 0.5 Э до 6 кЭ. Газовыделение начинается через определенное время, которое зависит от интенсивности воздействия и происходит в течение небольшого промежутка времени.

Необходимым условием для реализации разложения в анионной подрешётке азидов тяжелых металлов является поставка дырок (дырки – основные носители заряда в данных материалах) в реакционные области, образованные краевыми дислокациями и облаком точечных дефектов, которая возможна при действии электрического поля (контактного и бесконтактного). Реакционные области находятся в приповерхностной области кристалла, и выходу дырок из объёма образца мешает поле объёмного заряда. Следовательно, появляется возможность объяснить иницирование химической реакции магнитным полем с помощью магнитоэлектрического эффекта. В этом случае разложение кристаллов происходит в результате поставки дырок внутренним электрическим полем, возникающим из-за поляризующего действия внешнего магнитного поля.

Таким образом, наличие обратного магнитоэлектрического эффекта позволило объяснить медленное разложение в анионной подрешётке, инициированное магнитным полем, а также направленное перемещение заряженных краевых дислокаций в магнитном поле в кристаллах азидов серебра. Экспериментально установлено, что при включении бесконтактного электрического поля, направленного противоположно магнитному, разложение в кристаллах азидов серебра не наблюдается.

Были определены напряжённости бесконтактного электрического поля, компенсирующие разложение в магнитном поле напряжённостью  $0.5 \div 6$  кЭ, которые составляют от 0.01 до 4 В/см. Также были проведены эксперименты по исследованию разложения при действии бесконтактных электрических полей указанного диапазона в кристаллах азидов серебра, и оказалось, что развитие реакции в приповерхностной области происходит в узком интервале значений напряжённости и с определенными временами воздействия, такими же по величине, как и в магнитном поле.

Природа магнитоэлектрического эффекта в азидов металлов может быть связана со следующими эффектами: в магнитном и электрическом полях вследствие магнито- и электрострикции в кристаллах возникают механические колебания, которые благодаря пьезоэффекту вызывают поляризацию.

1. Кузьмина Л.В., Крашенинин В.И., Материаловедение, **12**, 30–32, (2002)

2. Neal H.G., Nature., **172**, 30, (1953)



## ПРИМЕСНАЯ МОДЕЛЬ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В $\text{LiVCuO}_4$ И $\text{LiCu}_2\text{O}_2$

Фёдорова Н.С.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: boardilka@mail.ru

Мультиферроики — это соединения, в которых одновременно существуют магнитное и сегнетоэлектрическое упорядочения. Среди множества мультиферроиков практический интерес представляют лишь соединения с сильным взаимодействием магнетизма и сегнетоэлектричества, например, купраты  $\text{LiVCuO}_4$  и  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$ .

Целью данной работы является изучение влияния внешнего магнитного поля на электрическую поляризацию в  $\text{LiVCuO}_4$  и  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$  в рамках примесной модели, предполагающей, что эта поляризация возникает в результате обменного взаимодействия на  $\text{Cu}^{2+}$  центрах, замещающих ионы лития в  $\text{LiVCuO}_4$  и ионы  $\text{Cu}^{1+}$  в  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$ . Такое обменное взаимодействие может быть проиллюстрировано на примере одночастичного центра в кристаллографически симметричной позиции магнитного кристалла (основное состояние центра — чётное  $|g\rangle$ , возбуждённое — нечётное  $|u\rangle$ ):

$$\hat{V}_{ex} = \sum_n \hat{I}(\vec{R}_n) (\vec{s} \cdot \vec{S}_n), \quad (1)$$

где  $\vec{S}_n$  — окружающие спины,  $\hat{I}(\vec{R}_n)$  — матрица обменных интегралов  $I_{\alpha\beta}(R_n)$ ;  $\alpha, \beta = g, u$ . Недиагональная часть обменного взаимодействия смешивает состояния  $|g\rangle$  и  $|u\rangle$ , порождая ненулевую электрическую поляризацию в основном состоянии:

$$\vec{P} = 2c_{gu} \langle g | e \vec{r} | u \rangle = \sum_n \Pi_n (\vec{s} \cdot \vec{S}_n), \quad (2)$$

$$\Pi_n = 2I_{gu}(\vec{R}_n) \langle g | e \vec{r} | u \rangle / \Delta_{ug}, \quad (3)$$

где  $\Delta_{ug} = \varepsilon_u - \varepsilon_g$ ;  $\varepsilon_g, \varepsilon_u$  — энергии состояний  $|g\rangle$  и  $|u\rangle$ , соответственно [1,2].

Мы создали программу для расчёта электрической поляризации в  $\text{LiVCuO}_4$  и  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$  на основе описанной выше модели с учётом изменения структуры спиновой спирали под действием внешнего магнитного поля. Полученные результаты сравнивались с экспериментальными данными и предсказаниями других модельных подходов.

1. Moskvin A.S., Panov Yu.D., Drechsler S.-L., arXiv:0801.1975v1 [cond-mat.str-el] (2008)
2. Moskvin A.S., Drechsler S.-L., arXiv:0801.1102v1 [cond-mat.str-el] (2008)

## ИНДУЦИРОВАННЫЕ ДАВЛЕНИЕМ МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ $\text{Fe}_{0.49}(\text{Rh}_{1-x}\text{Pd}_x)_{0.51}$

Чиркова А.М.<sup>1\*</sup>, Баранов Н.В.<sup>1,2</sup>, Волегов А.С.<sup>1</sup>, Степанова Е.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: alisa.usu@e1.ru

Сплавы FeRh вблизи эквимолярного состава при повышении температуры испытывают магнитный фазовый переход первого рода из антиферромагнитного (АФМ) в ферромагнитное (ФМ) состояние при  $T_t \approx 320\text{--}340$  К, который сопровождается значительными изменениями различных физических свойств [1, 2]. Исследования под давлением показали, что в сплавах FeRh, находящимся в АФМ состоянии, при увеличении давления происходит расширение области существования антиферромагнетизма, а в ферромагнитных сплавах FeRh приложение давления вызывает переход в АФМ состояние [2].

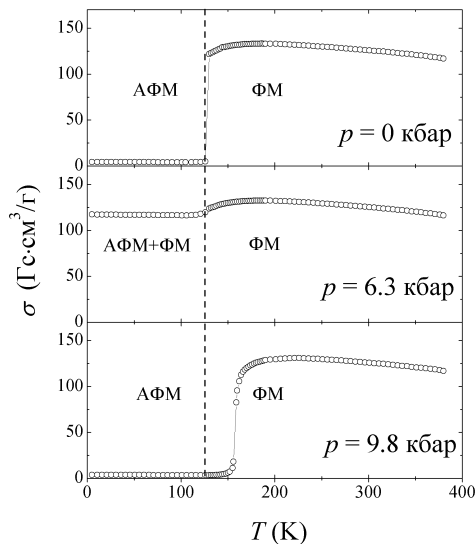


Рис. 1. Температурные зависимости намагниченности под давлением, в поле  $H = 10$  кЭ

при нулевом давлении. Такое поведение, по-видимому, связано с особенностями кривой плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми в этом сплаве и с влиянием на электронную структуру и плотность состояний таких факторов как замещение родия палладием и изменение межатомных расстояний с приложением давления.

Частичное замещение родия палладием приводит к немонотонному изменению критической температуры  $T_t$  АФМ-ФМ перехода [1], в то время как объём элементарной ячейки решетки сплавов  $\text{Fe}_{0.49}(\text{Rh}_{1-x}\text{Pd}_x)_{0.51}$  монотонно возрастает с ростом  $x$ . АФМ упорядочение наблюдается при  $0 < x < 0.12$ , а при  $x \geq 0.12$  сплавы находятся в ФМ состоянии во всем интервале температур до температуры Кюри  $T_C \approx 670$  К.

В данной работе было исследовано влияние давления на магнитное состояние сплава  $\text{Fe}_{0.49}(\text{Rh}_{0.92}\text{Pd}_{0.18})_{0.51}$ , который обладает минимальным значением температуры АФМ-ФМ перехода  $T_t \approx 125$  К [1]. На рис.1 приведены температурные зависимости намагниченности образца при давлениях до 10 кбар. Поведение сплава оказалось неожиданным: приложение давления привело сначала к появлению индуцированного ФМ состояния, а затем при дальнейшем увеличении давления — к возвращению АФМ состояния с температурой перехода на 30 К выше, чем в исходном состоянии

1. Baranov N.V., Barabanova E.A., Journal of Alloys and Compounds, **219**, 139 (1995)

2. Vinokurova L.I., Vlasov A.V., Kulikov N.I. and Pardavi-Horvath M., Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **25**, 201 (1981)

**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ  
И КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ**



## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАПРАВЛЯЮЩИХ ВСТАВОК НА ИНТЕНСИВНОСТЬ ТЕПЛООБМЕНА ПРИ КОНДЕНСАЦИИ В ПЛОСКОЩЕЛЕВОМ КОНДЕНСАТОРЕ КОНТУРНОЙ ТЕПЛОВОЙ ТРУБЫ

*Бартули Э.Ф.\* , Вершинин С.В., Майданик Ю.Ф.*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: ebartuli@gmail.com

Контурные тепловые трубы (КТТ) представляют собой высокоэффективные теплопередающие устройства, работающие по замкнутому испарительно-конденсационному циклу. Одним из основных компонентов КТТ является конденсатор. Для охлаждения электроники наиболее удобны плоскощелевые конденсаторы, поскольку они весьма компактны, имеют относительно большую теплообменную поверхность и хорошо адаптируются к существующим стокам тепла. Характерная особенность таких конденсаторов связана с тем, что процесс конденсации в них проходит в стеснённых условиях при интенсивном воздействии набегающего пара на плёнку конденсата.

Теплообменные процессы в конденсаторе КТТ в значительной мере влияют на рабочие характеристики устройства и, вместе с тем, они до сих пор остаются недостаточно исследованными. В Институте теплофизики была разработана экспериментальная ячейка в виде плоскощелевого конденсатора медь-водяной КТТ с поперечным сечением  $40 \times 1$  мм. Конструкция ячейки позволяла проводить визуальные наблюдения за теплообменным процессом и измерять площадь поверхности конденсации.

Целью работы являлось исследование влияния направляющих вставок на интенсивность теплообмена при конденсации воды в плоскощелевом конденсаторе КТТ.

Были проведены испытания устройства с продольными направляющими вставками в конденсаторе и без них при различных температурах охлаждения. Тепловая нагрузка варьировалась в диапазоне от 100 до 500 Вт.

Обнаружено, что использование продольных направляющих вставок в конденсаторе КТТ повышает интенсивность теплообменных процессов при конденсации (рис. 1). Это связано с увеличением локальной скорости потока пара при движении в конденсаторе и турбулентацией плёнки конденсата.

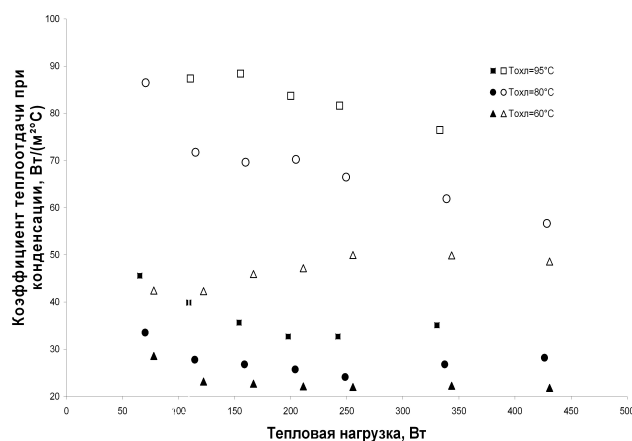


Рис. 1. Зависимость коэффициентов теплоотдачи от тепловой нагрузки при различных температурах охлаждения конденсатора: ● ▲ ■ — для конденсатора без направляющих вставок; ○ △ □ — для конденсатора с направляющими вставками

## ИССЛЕДОВАНИЕ КАВИТАЦИИ ЛЕННАРД-ДЖОНСОВСКОЙ ЖИДКОСТИ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Бобров К.С.\*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: konst216@gmail.com

Благодаря развитию компьютерной техники, появилась возможность проводить исследования процесса кавитации жидкости с помощью методов компьютерного моделирования (молекулярной динамики).

В работе использовался потенциал межчастичного взаимодействия Леннарда-Джонса, который учитывает силы притяжения между молекулами. Этот потенциал позволяет моделировать вещество в растянутом состоянии (т.е. при отрицательных давлениях).

Исследовалась спонтанная кавитация растянутой леннард-джонсовской жидкости. Компьютерные эксперименты проводились для систем, содержащих 2048, 8788, 32000 и 108000 частиц, помещённых в кубическую ячейку с периодическими граничными условиями. Все расчёты проводились в NVE-ансамбле. В качестве параметров обезразмеривания термодинамических величин использовались параметры потенциала Леннарда-Джонса  $\sigma = 0.3405$  нм,  $\epsilon = 1.654019 \cdot 10^{-21}$  Дж, постоянная Больцмана  $k_B = 1.3806504 \cdot 10^{-23}$  Дж/К, масса атома аргона  $m = 6.6336 \cdot 10^{-26}$  кг. Шаг интегрирования классических уравнений движения по времени варьировался от  $\tau = 1 \cdot 10^{-15}$  с до  $\tau = 5 \cdot 10^{-15}$  с. Радиус обрезания потенциала равнялся  $r_c = 6.576\sigma$ . В ходе компьютерного эксперимента рассчитывались давление, температура и внутренняя энергия. Расчёты проведены при температурах  $T^*$  равных 0.35, 0.4, 0.5 и 0.7.

Все расчёты начинались в стабильной области. В ходе процесса растяжения систем, они переводились в метастабильное состояние. Процесс кавитации жидкости фиксировался по резкому росту давления и температуры в системе.

Появление жизнеспособного пузырька (дырки) в переохлаждённой жидкости является случайным статистическим событием. Основной характеристикой такого процесса является частота нуклеации  $J$ . При фиксированных термодинамических условиях ( $p, T$ ) частота нуклеации может быть рассчитана через среднее время жизни метастабильной системы  $\bar{\tau}$  по формуле  $J = (\bar{\tau}V)^{-1}$ , где  $V$  — объём моделируемой системы.

В состоянии растянутой жидкости при заданной плотности получено более 100 начальных конфигураций (время ожидания критического пузырька (дырки) гораздо больше масштаба времени эксперимента). После этого все конфигурации переводились в область глубокой метастабильности, путём дальнейшего растяжения. В эксперименте фиксировалось время ожидания появления в системе критического пузырька (дырки). На основе полученных данных построены гистограммы времён ожидания критического пузырька (дырки). Установлено, что распределение событий кавитации во времени описывается пуассоновским распределением также как и распределение событий кристаллизации (при положительных и отрицательных давлениях). Были сопоставлены скорости роста пузырька (дырки) при кавитации и зародыша новой фазы при кристаллизации пересжатой жидкости. При обработке данных удалось визуализировать процесс образования пузырька (дырки).

## ИЗУЧЕНИЕ ГРАНИЦЫ СУЩЕСТВОВАНИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗЫ В ТВЁРДЫХ РАСТВОРАХ FeSe-FeTe

*Вешкурова К.А.<sup>1\*</sup>, Меренцов А.И.<sup>1,2</sup>, Волегов А.С.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kristina-veshkur@mail.ru

Интерес к классу высокотемпературных сверхпроводников возник с открытием сверхпроводимости в оксипниктидах железа [1], слоистых соединениях, аналогичных по структуре к ВТСП купратам. В последствие оказалось, что переход в СП-состояние присутствует также у более простых по структуре соединений — халькогенида железа [2]. Температура перехода не так велика, как у ВТСП купратов и составляет порядка 24 К. При приложении давления в соединении Fe<sub>1.02</sub>Se возникает сверхпроводящая фаза высокого давления с максимальной температурой перехода 30 К при давлении 1.8 ГПа [3]. Замещение Se на Te приводит к возникновению химического давления внутри соединения Fe(Se<sub>1-x</sub>Te<sub>x</sub>), что может привести к эффектам, аналогичным эффектам при механическом давлении. Таким образом, мы надеемся получить СП переход при более высоких температурах за счёт повышения ионного радиуса халькогена.

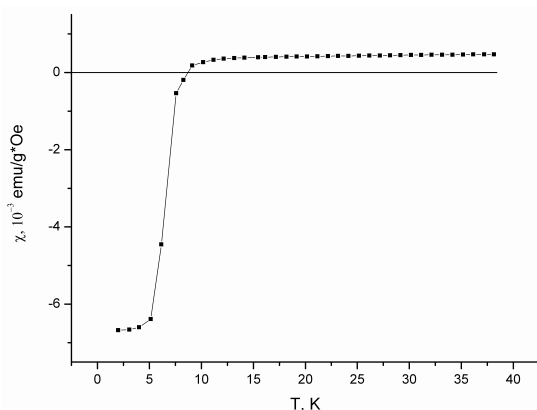


Рис. 1. Зависимость магнитной восприимчивости в постоянном магнитном поле 2 Э от температуры для полукристаллического материала FeSe<sub>0.8</sub>Te<sub>0.2</sub>

Образцы FeSe<sub>1-x</sub>Te<sub>x</sub> (0.6 < x < 0.9) синтезированы при температуре 840 °С в течение четырёх дней, FeTe<sub>x</sub> (x = 1, 0.9) при температуре 800 °С в течение четырёх дней, FeSe<sub>1-x</sub>Te<sub>x</sub> (0.1 < x < 0.5) и FeSe<sub>x</sub> (x = 1, 0.92) при температуре 650 °С в течение 3 дней. Гомогенизационный отжиг всех синтезированных соединений проводился в режиме: нагрев от комнатной температуры до 800 °С за 6 часов, выдержка при температуре 800 °С в течение 48 часов, охлаждение до комнаты в течение 7 часов. На синтезированных материалах были проведены измерения электрических и магнитных свойств. Типичная кривая температурной зависимости магнитной восприимчивости, демонстрирующая переход в СП состояние, приведена на Рис. 1. Обнаружена куполообразная зависимость температуры СП перехода от относительной концентрации халькогенов, что аналогично зависимости температуры СП перехода от давления [4].

*Работа выполнена при финансовой поддержке: РФФИ Грант № 09-03-0053-а, РФФИ Грант № 09-08-00073-а, программа Минобрнауки РНП.2.1.1.1682*

1. Kamihara Y, Watanabe T, Hirano M, Hosono H. J., Am. Chem. Soc., **130**, 3296 (2008)
2. F.C. Hsu, J.Y. Luo, K.W. The, T.K. Chen, T.W. Huang, P.M. Wu, Y.C. Lee, Y.L. Huang, Y.Y. Chu, D.C. Yan, and Maw-Kuen Wu., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., **105**, 14262 (2008)
3. V.G. Tissen, E.G. Ponyatovsky, M.V. Nefedova, A.N. Titov and V.V. Fedorenko, Phys. Rev. B, **80**, 092507 (2009)

## ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА ТЕРМИЧЕСКИЙ И МЕХАНИЧЕСКИЙ ГИСТЕРЕЗИСЫ В МОНО- И ПОЛИКРИСТАЛЛАХ НИКЕЛИДА ТИТАНА

Данильсон Ю.Н.<sup>1\*</sup>, Киреева И.В.<sup>2</sup>, Чумляков Ю.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

<sup>2</sup>ОСП «Сибирский физико-технический институт Томского госуниверситета», г. Томск, Россия

\*E-mail: lesoto@sibmail.com

На моно- и поликристаллах никелида титана Ti-50.7Ni (ат. %) исследовано влияние насыщения водородом при плотности тока  $j = 70 \text{ mA/cm}^2$  и  $T = 300 \text{ K}$  на термический и механический гистерезисы и осевые напряжения  $\sigma_{0.1}$  при деформации растяжением в зависимости от времени наводороживания  $t = 0-5$  часов и температуры испытаний.

Показано, что насыщение водородом в интервале времени  $t = 0-5$  часов приводит к единым закономерностям в изменении температур мартенситного превращения (МП) для моно- и поликристаллов: температуры начала  $M_s$  и конца  $M_f$  прямого МП при охлаждении понижаются, а температуры начала  $A_s$  и конца  $A_f$  обратного МП при нагреве остаются практически неизменными относительно исходного состояния. Максимальный эффект влияния водорода на температуры МП наблюдается при наводороживании в течение  $t = 4$  часа: в монокристаллах  $M_s$  понижается на  $11 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $M_f$  на  $40 \text{ }^\circ\text{C}$ ; в поликристаллах  $M_s$  понижается на  $15 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $M_f$  на  $10 \text{ }^\circ\text{C}$ . Таким образом, насыщение водородом в течение  $t = 4$  часа характеризуется большим переохлаждением  $\Delta_1 = M_s - M_f$  по сравнению с кристаллами без водорода, что свидетельствует об увеличении накопления упругой энергии при прямом МП при насыщении водородом.

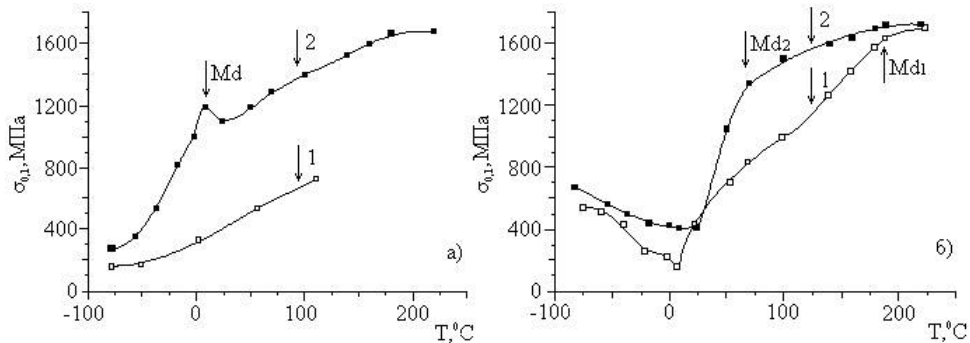


Рис. 1. Зависимость осевых напряжений  $\sigma_{0.1}$  от температуры для монокристаллов (123) (а) и поликристаллов (6) сплава Ti-50.7Ni: 1 – без водорода; 2 – после наводороживания в течение 4 ч. в  $\text{H}_2\text{SO}_4$  при  $T = 300 \text{ K}$  и  $j = 70 \text{ mA/cm}^2$

Установлено, что при насыщении водородом в течение  $t = 4$  часа для моно- и поликристаллов наблюдаются единые закономерности изменения  $\sigma_{0.1}$  от температуры: 1) уменьшение  $\sigma_{0.1}$  при температуре  $T = M_s$ ; 2) увеличение уровня напряжений  $\sigma_{0.1}$  высокотемпературной B2-фазы и напряжений  $\sigma_{0.1}$  для образования мартенсита под нагрузкой, которые описываются соотношением Клайперона-Клаузиуса; 3) понижение температуры  $M_d$ , при которой напряжения высокотемпературной фазы равны напряжениям образования мартенсита под нагрузкой. Быстрый рост напряжений в области образования мартенсита под нагрузкой и понижение  $M_d$  приводят к уменьшению температурного интервала образования мартенсита под нагрузкой, и как следствие, к наблюдению сверхэластичности в узком температурном интервале. Исследование петель сверхэластичности показывает, что наводороживание приводит к увеличению механического гистерезиса  $\Delta\sigma$  относительно кристаллов без водорода.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 10-03-00154 – а.*



## СТРУКТУРНЫЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА ВБЛИЗИ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ ПЕРЕХОДА

*Забегаяев С.О.<sup>1,2\*</sup>, Мокшин А.В.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>) Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

<sup>2</sup> Татарский государственный гуманитарно-педагогический университет, г. Казань, Россия

\*E-mail: szabegaev@yandex.ru

В работе выполнено моделирование молекулярной динамики коллоидного раствора вблизи золь-гель перехода. Исследуемая система состояла из  $N=10976$  частиц, распложенных в кубической ячейке с периодически граничными условиями. Взаимодействие частиц осуществлялось с помощью ДЛВО (Дерягин-Ландау-Вервей-Овербек) потенциала, где наряду с силами Ван-дер-Ваальса, частицы испытывают дальнедействующее электростатическое отталкивание [1,2]:

$$U_{ij} = \varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{36} - B \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 + C \frac{e^{-r/\xi}}{r/\xi} \right], \quad (1)$$

где  $A=3.56$ ,  $B=7.67$ ,  $C=36.79$ ,  $\xi=0.49$  и  $\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j)/2$  [3,4].

Вычисляются и анализируются зависимость радиуса гирации  $R_g^2$  от размера кластеров и распределение кластеров по размеру при различных значениях температуры и объёмной плотности. Исследованы особенности поведения системы вблизи порога перколяции, а также найдены критические термодинамические параметры, при которых впервые появляется перколяционный кластер. Обнаружено, что фрактальная размерность, а следовательно, и структура кластеров при быстром охлаждении претерпевают изменения. Также на основе данных моделирования рассчитаны корреляционная функция Ван-Хова, некогерентная функция рассеяния и средне-квадратичное смещение частиц при различных значениях температуры и объёмной плотности. Обнаружено, что в окрестности этого золь-гель перехода в динамике частиц наблюдается неоднородность, подобная той, что ранее была обнаружена в стекольных системах [5-7]. Наблюдаемая динамическая неоднородность проявляется в отклонении плотности вероятности смещения частиц от гауссова распределения, а также в двухступенчатой структурной релаксации. С помощью параметра негауссовости  $\alpha_2(t) = 3\langle r^4(t) \rangle / 5\langle r^2(t) \rangle^2 - 1$  выполнена численная оценка эффектов динамической неоднородности. Установлено, что динамическая неоднородность становится более выраженной с уменьшением температуры. На основе параметра негауссовости и температурной зависимости размера наиболее крупного кластера в системе определена температура геляции  $T_g = 0.2 \pm 0.02$ ,  $0.16 \pm 0.05$  и  $0.12 \pm 0.05 \varepsilon / k_B$  при объёмных плотностях  $\varphi = 0.13$ ,  $0.11$  и  $0.1$  соответственно.

*Работа поддержана фондами РФФИ (грант № 92-02-91053-НЦНИ-а, № 08-02-00123-а).*

1. J.N. Israelachvili, Intermolecular and surface forces, Academic press, London, (1985)
2. J.C. Crocker and D.G. Grier, Phys. Rev. Lett., **73**, 352 (1994)
3. A. Coniglio, J. Phys.: Condens. Matter, **16**, S4831 (2004)
4. A. de Candia, Physica A, **358**, 239 (2005)
5. T. Odagaki, Y. Hiwatari. Phys. Rev. A, **43**, 1103 (1991)
6. L. Cipelletti et al. Faraday Discuss., **123**, 237 (2003)
7. M.J. Solomon, P. Varadan. Phys. Rev. E, **63**, 051402 (2001)

**ВРЕМЯ ЖИЗНИ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ  
ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ «ВОДА – АМОРФНЫЙ ЛЁД»**

*Зарипов Р.Р.<sup>1\*</sup>, Хуснутдинов Р.М.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Татарский государственный гуманитарно-педагогический университет, г. Казань, Россия

<sup>2</sup>Казанский (приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия

\*E-mail: Zaripov-rr@mail.ru

В настоящей работе приводятся результаты исследования структурных особенностей и сетки водородных связей (ВС) воды в широком диапазоне термодинамического состояния, выполненного численно с помощью компьютерного моделирования молекулярной динамики.

Исследуемая система состояла из  $N = 4000$  молекул воды, расположенных в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Взаимодействие частиц в системе осуществлялось на основе пятиточечного модельного потенциала TIP5P [1]. Конфигурация сетки водородных связей была получена при значениях внешнего давления  $p = 1, 1000, 2000, 3000, 4000$  и  $5000$  атмосфер. Для каждого значения давления система была уравновешена при температуре  $300$  К, а затем быстрым охлаждением приведена в аморфное состояние до температуры  $200$  К.

Анализ сетки водородных связей был выполнен на основе геометрического критерия с предельными значениями  $R_{O_i H_j} \leq 2.44$  Å,  $R_{O_i O_j} \leq 3.39$  Å и  $\alpha_{O_i O_j H_j} \leq 30^\circ$  [2]. Для исследования времени жизни водородных связей была рассмотрена зависимость вида:

$$F(t) = \frac{N(t)}{N(0)}, \quad (1)$$

где  $N(0)$  и  $N(t)$  – число водородных связей в начальный момент и в момент времени  $t$  соответственно [3]. На основе данной зависимости было получено среднее значение времени жизни водородной связи  $\tau_{HB}$  для всех исследуемых термодинамических состояний системы (Рис.1).

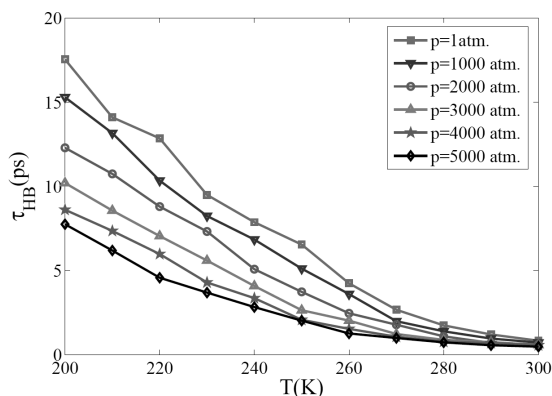


Рис. 1. Температурная зависимость среднего времени жизни ВС

Показано, что  $\tau_{HB}$  имеет обратно пропорциональную зависимость от давления, т.е. среднее время жизни ВС уменьшается с увеличением давления.

Работа выполнена при финансовой поддержке фондов РФФИ (грант № 09-02-91053-НЦНИ\_а, № 08-02-00123-а).

1. Mahoney M.W., Jorgensen W.L., J. Chem. Phys., **112**, 20 (2000)
2. Маленков Г.Г., Журнал структурной химии, **47**, 5-35 (2006)
3. Sciortino F., Fornili S., J.Chem.Phys., **90**, 2786-2792,(1989)

**ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ  
НА ЦИКЛИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТИ  
[123]-МОНОКРИСТАЛЛОВ NiFeGaCo**

*Казанцева Л.П.\* , Тимофеева Е.Е.*

ОСП «Сибирский физико-технический институт ТГУ», г. Томск, Россия

\*E-mail: lija@sibmail.com

Показано [1], что монокристаллы  $Ni_{49}Fe_{19}Ga_{27}Co_6$  (ат.%) после роста (I), ориентированные вдоль [001] направления, отличаются высокой прочностью мартенситной фазы, высокой циклической стабильностью критических напряжений и величины обратимой деформации при реализации сверхэластичности (СЭ), в отличие от [123]-монокристаллов, петля СЭ которых сильно деградирует с числом циклов. В [123]-кристаллах после роста (I) при изотермических циклах «нагрузка-разгрузка» наблюдается уменьшение критических напряжений образования мартенсита на 22% и величины обратимой деформации на 35%, рост коэффициента деформационного упрочнения  $\theta$  в 1.8 раз. Поэтому целью данной работы является увеличить циклическую стабильность [123]-кристаллов за счёт проведения термических обработок, что позволит повысить прочностные свойства В2-фазы и подавит процессы пластического течения при развитии превращения. Монокристаллы выращивали методом Бриджмена в среде инертного газа. Образцы закаливали в воду от 1373 К, а затем отжигали при 673 К, 1 час (II), 673 К, 4 часа (III), 823 К, 0.5 час (IV) с последующим охлаждением на воздухе. Циклические испытания (100 циклов) проводили при температуре  $T_K=294$  К в условиях СЭ.

Как показывает исследование температурной зависимости электросопротивления во всех состояниях (I – IV) при охлаждении/нагреве мартенситное превращение (МП) развивается в одну стадию. По сравнению с исходным состоянием (I) отжижки приводят к снижению температур МП на 9 К ÷ 14 К и небольшого увеличения температурных интервалов прямого  $\Delta_1$  и обратного  $\Delta_2$  МП.

Во всех структурных состояниях наблюдается значительное снижение критических напряжений образования мартенсита после первого изотермического цикла. При дальнейших циклических воздействиях кристаллы после отжигов II и III проявляют высокую стабильность СЭ. Отжижки II и III приводят к уменьшению рассеяния энергии при развитии МП под нагрузкой – механический гистерезис уменьшается в 3.5–4 раза по сравнению с исходным состоянием I, и не зависит от числа циклов. Критические напряжения и коэффициент деформационного упрочнения в состоянии II остаются постоянными при изотермических циклах. Величина обратимой деформации для монокристаллов в состояниях II и III уменьшается с увеличением числа циклов с 2 до 100 на 18% и 22%, соответственно. Монокристаллы после отжига VI, как и кристаллы I, характеризуются слабой циклической стабильностью: с увеличением числа циклов сильно уменьшается обратимая деформация (77%), критические напряжения падают на 25%, возрастает коэффициент деформационного упрочнения в 2.6 раз.

Таким образом, установлено, что монокристаллы  $Ni_{49}Fe_{19}Ga_{27}Co_6$  (ат.%) после отжигов при 1373 К, 25 мин + 673 К, 1 и 4 часа являются более устойчивыми к циклическим испытаниям при реализации СЭ, что является важным свойством для практического применения.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ грант № 09-03-00103 и ФЦП, госконтракт № 14.740.11.0258 от 17.09.2010*

1. Казанцева Л.П., Тимофеева Е.Е., Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник материалов VI Всероссийской конференции молодых учёных (14-17 апреля 2010.,г.Томск), (2010)

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СЛОИСТОГО КОМПОЗИТА ТИТАНОВЫЙ СПЛАВ – ОРТОРОМБИЧЕСКИЙ АЛЮМИНИД ТИТАНА

*Коробов Ю.А.\* , Латышов М.Н.*

Стерлитамакская государственная педагогическая академия им. Зайнаб Бишевой, г. Стерлитамак, Россия

\*E-mail: yko@yandex.ru

В работе проведено исследований фазового и напряжённого состояния зоны сварного соединения «титановый сплав ВТ25У – орторомбический алюминид титана», сформированного путём диффузионной сварки, с целью выяснения физических процессов, происходящих в зоне сварного соединения и оптимизации режима диффузионной сварки.

Под микронапряжениями обычно понимают напряжения, которые уравниваются в объёме отдельных кристаллов или частей кристаллов (мозаичных блоков). Расчёт их основан на представлении о том, что они связаны с неоднородной упругой деформацией кристаллов и, как следствие этого, с закономерным неоднородным изменением межплоскостных расстояний.

Определение фазового состава и уровня внутренних напряжений в материале зоны сварного соединения при комнатной температуре осуществлялось методом рентгенофазового анализа.

В исследованиях использовался рентгеновский дифрактометр Bruker AXS D8 ADVANCE (с использованием зеркала Гёбеля для монохроматизации пучка, щелей Соллера для ограничения расхождения пучка, излучение  $\text{CuK}_\alpha$ , напряжение на аноде  $U = 40 \text{ kV}$ , анодный ток  $I = 40 \text{ mA}$ ) шаг 0.05, время сканирования 8 сек на точке.

Далее был проведен более точный расчёт наличия микронапряжений и размеров областей когерентного рассеяния.

Рентгенография проводилась на аппарате XRD7000 Shimadzu,  $\text{CuK}_\alpha$ -излучение, графитовый монохроматор, диапазон углов  $2\theta=10\div 80^\circ$ , напряжение на трубке 40 кВ, ток 30 мА, скорость сканирования 2 град/мин. Фазовый анализ выполнен с использованием базы данных ICDD (PDF-2).

В результате диффузионной сварки на границе соединения двух материалов наблюдается некоторое обогащение интерметаллидного слоя ниобием, цирконием. Хотя состав сам по себе остаётся стабильным. Отжиг сплава ВТ25У и его фазовый состав после охлаждения при комнатной температуре представлен в основном орторомбической фазой. Отжиг интерметаллидной фазы к существенным изменениям фазового состава не приводит. В результате диффузионной сварки ВТ25У в зоне сварного шва находится в ненапряжённом состоянии. Это следует из анализа уширений линий. Фазовый состав вблизи сварного шва представлен  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазами. Вид дифрактограммы свидетельствует о сильно деформированном состоянии материала. Анализ профиля линий показал, что уширение рентгеновских линий вызвано мелкодисперсностью материалов. Уширение линий орторомбической фазы отожжённого образца и самого интерметаллида в сварном шве неодинаково. Уширение линий интерметаллида вызвано как наличием микронапряжений, так и мелкодисперсностью образца.

Фазовый состав титанового сплава ВТ25У представлен орторомбической фазой и  $\beta$ -фазой. В результате диффузионной сварки не происходит существенного отжига материала и мелкокристаллическое состояние титанового сплава сохраняется.

Химический состав зоны сварного шва и вблизи сварного шва не подвергается существенным изменениям. В процессе диффузионной сварки на границе шва в небольшом слое происходит перераспределение концентрации легирующих элементов.

## КОНКУРЕНЦИЯ ЗАРЯДОВОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ И СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА В СИСТЕМАХ СО СМЕШАННОЙ ВАЛЕНТНОСТЬЮ

Королёв А.В.\*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: alexey1989@e1.ru

В настоящей работе рассматривается простая модель высокотемпературного сверхпроводника типа  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , неустойчивого относительно переноса заряда с диспропорционированием и формированием системы электронных  $\text{CuO}_4^{7-}$  и дырочных  $\text{CuO}_4^{5-}$  центров. Такая электронно-дырочная жидкость может рассматриваться как система электронных пар — локальных синглетных бозонов, движущихся по решётке из дырочных центров [1]. Замещение лантана стронцием ( $\text{La}^{3+} \rightarrow \text{Sr}^{2+}$ ) приводит к отклонению от «половинного», заполнения, то есть понижению концентрации бозонов от  $n = 0.5$  до  $n = 0.5 - x/2$ .

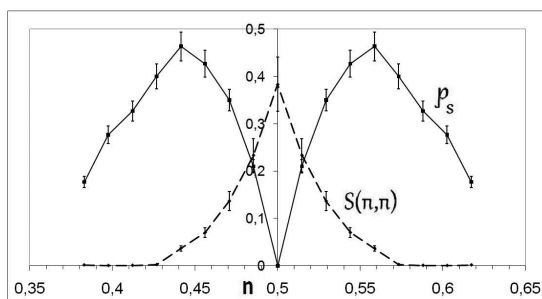


Рис. 1. График зависимости структурного фактора  $S(\pi, \pi)$  и плотности сверхпроводящей компоненты  $\rho_s$  от концентрации локальных бозонов

Численное моделирование проводилось квантовым методом Монте-Карло [2] на квадратной решетке  $20 \times 20$  центров  $\text{CuO}_4$  со случайным распределением примесного потенциала ионов  $\text{Sr}^{2+}$  в рамках псевдоспинового формализма [1]. Ранее эта модель рассматривалась методом классического Монте-Карло [3], что не позволяет получить корректную картину эволюции фазового состояния системы при отклонении от половинного заполнения, т.к. в рамках этого метода использовалось приближение молекулярного поля и принципиально квантовая задача сводилась к квазиклассической. Нами рассчитывались структурный фактор  $S(\pi, \pi)$ , характеризующий зарядовое упорядочение типа шахматного порядка, а также плотность распределения модуля сверхпроводящего параметра порядка  $\rho_s$ , фактически число узлов решётки с отличным от нуля значением сверхпроводящего параметра порядка. Результаты численного расчёта для двух величин представлены на рис. 1.

Из графиков видно, что при половинном заполнении в системе при  $T = 0$  устанавливается зарядовый порядок (диэлектрическая фаза) и отсутствует сверхпроводящая фаза. Однако отклонение от половинного заполнения сопровождается разрушением зарядового порядка и появлением сверхпроводящего параметра порядка, хотя и без упорядочения его фазы. Максимальная плотность сверхпроводящей компоненты приходится на величину допирования  $n = 6 - 7\%$  по бозонам ( $x = 0.12 - 0.14$  по электронам/дыркам — «optimal doping»). При большем отклонении ( $|n - 0.5| > 0.09$  — «overdoping») возникает неупорядоченная фаза с разрушенным зарядовым и локальным сверхпроводящим параметрами порядка: при достаточно большом уровне допирования вблизи ионов стронция возникают «дырочные капли», которые, разрастаясь, вытесняют сверхпроводящую фазу.

Автор выражает благодарность А.С. Москвину за постановку задачи и обсуждение результатов, а также фонду РФФИ (гранты 08-02-00633 и 10-02-96032) за финансовую поддержку.

1. A.S. Moskvina, *Low Temp. Phys.* **33**, 234 (2007).
2. Anders W. Sandvik, Juhani Kurkijarvi, *Phys. Rev. B*, **43**, 5950 (1991)
3. А.В. Королёв, XXXIII Зимняя международная школа физиков-теоретиков «Коуровка». Тезисы докладов, 114 (2010)

## ВЛИЯНИЕ ЧИСЛА ВАРИАНТОВ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ НА СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТЬ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ФЕРРОМАГНИТНОГО СПЛАВА $\text{Co}_{49}\text{Ni}_{21}\text{Ga}_{30}$

Крестина И.В.\*, Киреева И.В., Чумляков Ю.И.

ОСП «Сибирский физико-технический институт Томского Государственного университета», г. Томск, Россия

\*E-mail: irbas@sibmail.com

На монокристаллах  $\langle 123 \rangle$  ферромагнитного сплава  $\text{Co}_{49}\text{Ni}_{21}\text{Ga}_{30}$  с  $\text{B2-L1}_0$  мартенситным превращением (МП) исследована величина сверхэластичности (СЭ) в зависимости от числа вариантов частиц и температуры испытания при деформации сжатием.

Показано, что при старении при  $T = 623$  К в течение 3 часов происходит выделение частиц  $\gamma'$ -фазы размером  $d = 5-7$  нм, которые имеют неравноосную форму с плоскостью габитуса параллельной плоскости (111)  $\text{B2}$ -фазы. При старении под сжимающей нагрузкой  $\sigma = 150$  МПа в монокристаллах  $\langle 123 \rangle$  растёт один вариант частиц  $\gamma'$ -фазы, а при старении в свободном состоянии четыре варианта частиц.

Установлено, что старение при  $T = 623$  К в течение 3 часов, во-первых, приводит к понижению температуры  $M_s$  до 154 К относительно закалённых кристаллов. Во-вторых, старение под сжимающей нагрузкой сдвигает  $M_s$  на 19 К в область высоких температур по сравнению с кристаллами, состаренными без нагрузки. В-третьих, напряжения для образования  $\text{L1}_0$ -мартенсита под нагрузкой  $\sigma_{\text{кр}}(T)$  в кристаллах, состаренных под нагрузкой, оказываются меньше, чем в кристаллах, состаренных без нагрузки. Образование одного варианта частиц  $\gamma'$ -фазы в кристаллах  $\langle 123 \rangle$  под нагрузкой приводит к появлению внутренних напряжений, которые способствуют повышению  $M_s$  и понижению  $\sigma_{0,1}$  для  $\text{B2-L1}_0$  МП в кристаллах с одним вариантом частиц  $\gamma'$ -фазы по сравнению с четырьмя, где внутренние напряжения от каждого варианта частиц компенсируют друг друга. В-четвёртых, СЭ наблюдается в широком температурном интервале  $T = 296-623$  К, так же как и в состоянии после закалки, однако её величина при старении уменьшается в 2 раза по сравнению с кристаллами после закалки (рис. 1).

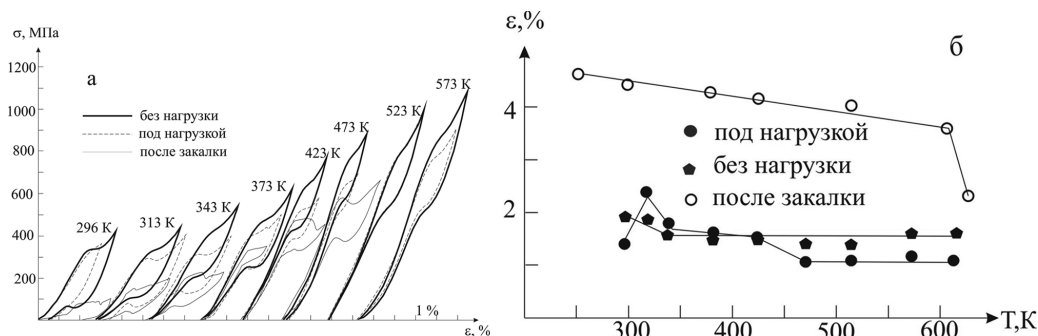


Рис. 1. а) кривые «напряжение-деформация» для монокристаллов  $\langle 123 \rangle$  ферромагнитного сплава  $\text{Co}_{49}\text{Ni}_{21}\text{Ga}_{30}$  при сжатии; б) зависимость величины  $\epsilon_{\text{СЭ}}$  от температуры при сжатии

Итак, впервые экспериментально показано, что величина СЭ, температуры МП в состаренных монокристаллах ферромагнитного сплава  $\text{Co}_{49}\text{Ni}_{21}\text{Ga}_{30}$  зависят от числа вариантов дисперсных частиц  $\gamma'$ -фазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 08-08-91952 ННАО-а, 09-08-92501-ИК-а и 10-03-00154, гранта CRDF RUE1-2940-TO-09.

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ  
ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕЙ КОРРЕЛЯЦИИ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ  
НА НЕРАВНОВЕСНУЮ КРИТИЧЕСКУЮ РЕЛАКСАЦИЮ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА**

*Медведева М.А.\*, Прудников П.В.*

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

\*E-mail: mmed@mail.ru

Известно, что в критической точке наряду с особенностями равновесных характеристик сингулярное поведение демонстрируют кинетические коэффициенты и динамические функции отклика, что обусловлено аномально большими временами релаксации сильно флуктуирующих величин. В этом плане, динамическое критическое поведение модели Гейзенберга значительно менее изучено, по сравнению с исследованиями статических свойств.

Модель Гейзенберга описывается гамильтонианом

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N p_i p_j \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad (1)$$

где  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  – трёхмерный единичный вектор в узле  $i$ ,  $J > 0$  характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер,  $p_i$  – случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе ( $p_i = 1$ , когда узел  $i$  занят спином, и  $p_i = 0$ , когда узел пуст).

В данной работе для описания дальнедействующей изотропной корреляции дефектов используется модель Вейнриба-Гальперина [1], когда парная корреляционная функция спадает с расстоянием по степенному закону  $g(x-y) \sim |x-y|^{-a}$ , где  $a = d-1$  – параметр корреляции дефектов структуры.

Для моделирования спиновых конфигураций в системе был применён алгоритм Метрополиса. Для получения значений динамического и статических индексов использовался метод коротковременной динамики. Для этого рассчитывались намагниченность  $M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$ , логарифмическая производная намагниченности  $\partial_\tau \ln M(t, \tau)|_{\tau=0} \sim t^{1/\nu z}$  и отношение  $F_2(t) = \langle M^2 \rangle / \langle M \rangle^2 \sim t^{d/z}$ , где  $d = 3$  – размерность системы,  $\tau = (T - T_c)/T_c$  – приведённая температура,  $z$  – динамический критический индекс, характеризующий асимптотическую зависимость времени релаксации системы  $\tau_p$ , как и времени корреляции состояний  $\tau_c$ , по мере приближения к критической температуре  $\tau_c, \tau_p \sim |T_c - T|^{-\nu}$ .

В данной работе [2] было показано, что дефекты, обладающие свойством дальней пространственной корреляции, изменяют критическое поведение не только систем с однокомпонентным параметром порядка, как в случае точечных дефектов, но и систем с многокомпонентными параметрами порядка. Был определён динамический критический индекс  $z = 2.285(45)$ . Найденное значение динамического критического индекса находится в хорошем согласии с результатами теоретической работы  $z = 2.2644$  [3].

*Работа поддержана грантами Министерства образования и науки РФ 2.1.1/930 и 02.740.11.0541, грантами РФФИ 10-02-00507, 10-02-00787 и грантом Президента РФ МК-3815.2010.2.*

1. Weinrib A., Halperin B.I., Phys. Rev. B, **27**, 413 (1983)
2. Прудников П.В., Медведева М.А., Жёлтышев П.А., Вестник ОмГУ, **4** (2010)
3. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Fedorenko A.A., Phys. Rev. B, **62**, 8777 (2000)

**КОРРЕЛЯЦИЯ ФАЗОВОЙ КАРТИНЫ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЫ  
С УЧАСТИЕМ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ-РЕЛАКСОРОВ**

*Миллер А.И.\* , Таланов М.В., Вербенко И.А.*

Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону, Россия

\*E-mail: milleriada@mail.ru

Многокомпонентные системы, в том числе с сегнетоэлектриками-релаксорами, являются основой большинства функциональных материалов пьезотехники. Целью данной работы является установление корреляций фазовой картины и электрофизических свойств твёрдых растворов, принадлежащих таким системам, так как это позволяет направленно изменять свойства объектов.

Нами были изучены твердые растворы системы  $PZN(PbNb_{2/3}Zn_{1/3}O_3)-PMN(PbNb_{2/3}Mn_{1/3}O_3)-PNN(PbNb_{2/3}Ni_{1/3}O_3)-PT(PbTiO_3)$ , которые получены твердофазным синтезом с использованием элементов колумбитного метода и спечены по обычной керамической технологии.

На рисунке представлены зависимости пиковых значений диэлектрической проницаемости  $(\epsilon/\epsilon_0)_m$ , коэффициента электромеханической связи планарной моды колебаний (Кр), пьезомодуля  $|d_{31}|$  (слева) и температурного сдвига  $\Delta T_m$  максимума  $(\epsilon/\epsilon_0)_m$ , меры размытия фазового перехода ( $\delta_\gamma$ ) и степени его диффузности ( $\gamma_{дифф}$ ) (справа) от концентрации титаната свинца ( $y$ ).

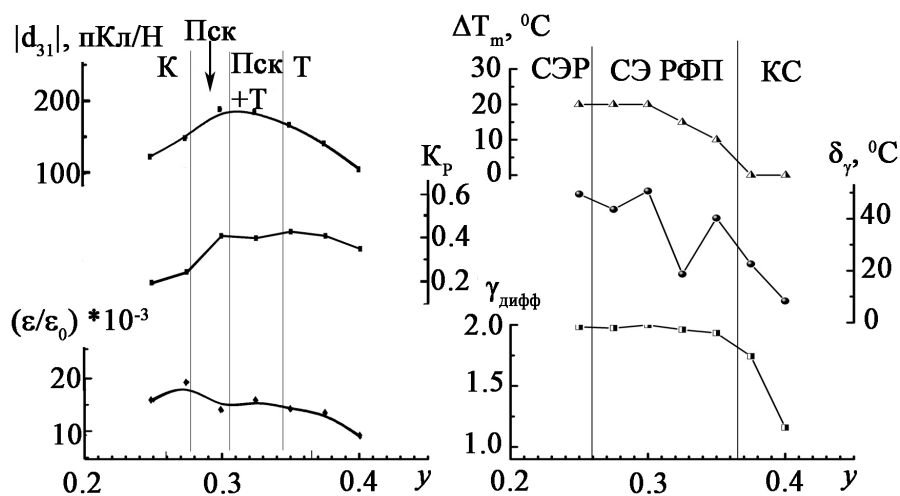


Рис. 1. Зависимости  $(\epsilon/\epsilon_0)_m$ , Кр,  $|d_{31}|$ ,  $\Delta T_m$  максимумов  $(\epsilon/\epsilon_0)_m$ ,  $\delta_\gamma$ ,  $\gamma_{дифф}$  от концентрации ( $y$ ). Фазы: К – кубическая, Пск – псевдокубическая, Т – тетрагональная

Хорошо видно, что в области морфотропного фазового перехода с сосуществующими Пск- и Т- фазами электрофизические параметры экстремальны, а по мере увеличения концентрации титаната свинца твердые растворы претерпевают переход от сегнетоэлектрика-релаксора (СЭР) к сегнетоэлектрику с размытым фазовым переходом (СЭРФП) и к классическому сегнетоэлектрику (КС).

Таким образом, было установлено, что электрофизические параметры в морфотропной области имеют максимальные значения, что позволяет создавать керамику с заданными параметрами.

*Выполнено при поддержке гранта РФФИ № 08-02-01013.*



**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ CdAs<sub>2</sub> И ZnAs<sub>2</sub> ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ**

Тебеньков А.В.<sup>1</sup>, Мирзагалямов Р.Р.<sup>1\*</sup>, Бабушкин А.Н.<sup>1</sup>, Моллаев А.Ю.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физики им. Х.И.Амирханова ДагНЦ РАН, г. Махачкала, Россия

\*E-mail: Mirzagalyamov@e1.ru

В работах проведённых ранее [1] электрические свойства полупроводников CdAs<sub>2</sub> и ZnAs<sub>2</sub> были исследованы при давлениях до 5 ГПа. В настоящей работе продолжено исследование данных образцов при более высоких давлениях с целью выявления возможных структурных изменений.

При давлениях 20–45 ГПа и комнатной температуре в камере Верещагина-Яковлева из синтетических алмазов АСПК [2] исследованы электрическое сопротивление и поперечное магнетосопротивление поликристаллических соединений CdAs<sub>2</sub> и ZnAs<sub>2</sub>. Сопротивление оценивали по падению напряжения, контактами к образцу служили наковальни. Максимальная величина поперечного магнитного поля составила 1 Тл. Проведена оценка времён релаксации электро-сопротивления образца при высоких давлениях в отсутствии и в максимальном поперечном магнитном поле

В отсутствие магнитного поля CdAs<sub>2</sub> и ZnAs<sub>2</sub> переходят в низкоомное состояние при давлении порядка 25–30 ГПа. Приложение поперечного магнитного поля величиной 1 Тл приводит к смещению перехода в низкоомное состояние в область давлений 35–40 ГПа. После снижения давления сопротивление образцов не возвращается в исходное состояние, что связано с необратимыми фазовыми изменениями в структуре материалов. При давлениях 25–35 ГПа барическая зависимость сопротивления CdAs<sub>2</sub> в магнитном поле имеет особенность. Известно [3], что CdAs<sub>2</sub> имеет особенности в энергии активации в диапазоне давлений 35–40 ГПа.

Наибольшее падение сопротивления при включении магнитного поля наблюдается в обоих образцах в области давлений 35–40 ГПа, и достигает примерно 15%. Этот диапазон давлений соответствует обнаруженным ранее особенностям электрофизических свойств [3,4]. Причины, вызывающие столь сильные зависимости от магнитного поля требуют дальнейших исследований. Исходя из имеющихся данных, можно предположить, что необратимые изменения связаны с необратимым фазовым переходом. Для подтверждения этого необходимы структурные исследования.

*Исследование выполнено при частичной поддержке гранта РФФИ-Урал № 10-02-96036.*

1. А.Ю. Моллаев, Л.А. Сайпулаева, А.Г. Алибеков, Физика и техника полупроводников, **43**, 6 (2009)
2. Л.Ф. Верещагин, Е.Н. Яковлев и др., Письма в ЖЭТФ, **16** 4, 240 (1972)
3. Моллаев А.Ю., Арсланов Р.К., Сайпулаева Л.А., Физика и техника высоких давлений, **15**, 1, 102-105 (2005)
4. Mollaev A., Arslanov R., Saypulaeva L., Babushkin A., Tatur S., Marenkin S., Vol'fkovich A., Materials, **41**, 2, 95-97 (2005)

## СПЕКТР КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ, ДИНАМИКА РЕШЁТКИ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЭЛЬПАСОЛИТЕ $\text{Rb}_2\text{KInF}_6$

*Орешонков А.С.\*, Втюрин А.Н., Крылов А.С., Крылова С.Н., Воронов В.Н.*

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, Россия

E-mail: oreshonkov@iph.krasn.ru

Перовскитоподобный кристалл  $\text{Rb}_2\text{KInF}_6$  относится к семейству эльпасолитов  $\text{A}_2\text{B}^{(1)}\text{B}^{(2)}\text{X}_6$ , где А,В – катионы металлов либо более сложные молекулярные ионы, X – анионы кислорода либо галогенов (пространственная группа  $\text{Fm } \bar{3}\text{m}$ ,  $Z=4$ ). При понижении температуры  $\text{Rb}_2\text{KInF}_6$  испытывает последовательно два структурных фазовых перехода: при  $T_1 = 283$  К в тетрагональную фазу с пространственной группой  $\text{I4/m}$  без изменения объема ячейки по сравнению с объемом кубической фазы и при  $T_1 = 264$  К в моноклинную фазу с пространственной группой  $\text{P12}_1/\text{n1}$  и с двумя молекулами в элементарной ячейке.

В данной работе была поставлена задача – исследовать спектры комбинационного рассеяния (КР)  $\text{Rb}_2\text{KInF}_6$  в широкой области температур, включающей точки фазовых переходов, произвести их интерпретацию с использованием численного моделирования динамики решетки и установить механизмы наблюдаемых фазовых переходов.

Для получения спектров КР в качестве источника возбуждения было использовано поляризованное излучение 514.5 нм  $\text{Ar}^+$  лазера (Spectra-Physics Stabilite 2017) мощностью 100 мВт (20 мВт на образце). Спектры в геометрии  $180^\circ$  были получены на спектрометре Horiba Jobin Yvon T64000 в частотном диапазоне от 20 до 1200  $\text{cm}^{-1}$ . Для температурных исследований использовался криостат ASR Closed Cycle Cryostat CS204-X1.SS. Точность стабилизации температуры образца во время съемки спектра не хуже 0.1 К. Диапазон температур, в котором проводилось исследование: 7–400 К. Количество линий на полученных спектрах КР согласуется с правилами отбора.

Для расчета спектра колебаний решетки был использован известный программный продукт LADY [1]. Для расчета межйонных взаимодействий была использована достаточно простая и распространенная модель «жестких ионов». Данная модель описывает взаимодействие изолированных сферических ионов с зарядом  $Z$ . Потенциальная функция представлена как сумма кулоновского потенциала и потенциала ближнего взаимодействия ионов. В качестве потенциала межатомного взаимодействия использовался потенциал Борна-Майера. Для нахождения параметров расчетной модели была написана программа оптимизации значения  $\lambda$ ,  $\rho$  и  $Z$  для кристалла  $\text{Rb}_2\text{KInF}_6$  с учетом структурных данных [2] и устойчивости решетки при нормальном давлении. Используя полученные таким образом данные, был произведен расчет спектров исследуемого кристалла.

Вычисленные спектры колебаний решетки хорошо согласуются с результатами экспериментов. Было установлено, что оба фазовых перехода связаны с конденсациями мягких мод. При температуре  $T_1 = 283$  К происходит конденсация моды  $F_g$ , связанная с поворотом октаэдра  $\text{InF}_6$ , ниже перехода эта мода восстанавливается и расщепляется в дублет. При  $T_2 = 264$  К происходит конденсация моды на границе зоны Бриллюэна, которая также связана с поворотами октаэдров.

1. Smirnov M.B., Kazimirov V.Yu., LADY: software for lattice dynamics simulations. JINR communications. E14-2001-159, Dubna (2001)
2. Александров К.С., Мисюль С.В., Молокеев М.С., Воронов В.Н., ФТТ, **51**, 2359, (2009)

**ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ДИССИПАТИВНЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ  
ФЕРРИТА ВИСМУТА, МОДИФИЦИРОВАННОГО ИОНАМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ  
МЕТАЛЛОВ, ПРИ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ**

*Павелко А.А.\* , Андрияшин К.П., Павленко А.В.*

Научно-исследовательский институт физики ЮФУ, г. Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: dipoleglass@gmail.com

В связи с наблюдающимся в последнее время резким усложнением микроэлектронных устройств, обусловленным необходимостью сочетания различных технологий записи, хранения и обработки информации, усилилось внимание к используемым в них мультифункциональным материалам с сегнетоэлектрическими, сегнетоэластическими, ферромагнитными и другими свойствами. Ограничения их практического использования связаны с кристаллографическими особенностями, определяющими не достаточно высокий уровень электрофизических и магнитных свойств, а также низкие значения коэффициентов связи между ними.

Настоящая работа посвящена изучению свойств одной из наиболее перспективных групп мультиферроиков на основе феррита висмута ( $\text{BiFeO}_3$ ), обладающего высокими температурами Кюри и Нееля. Объектами исследования являлись твердые растворы (ТР) бинарных систем состава  $\text{Bi}_{1-x}\text{A}_x\text{FeO}_3$  (где А = редкоземельный элемент (РЗЭ): La, Pr, Nd, Sm, Eu, Yd, Tb, Dy, Ho, Tm, Lu;  $x = 0.05 \div 0.20$ ,  $\Delta x = 0.05$ ). Образцы получены по обычной керамической технологии [1].

Рентгенографические исследования проводили по стандартным методикам. Измерение спонтанной намагниченности производили при комнатной температуре с помощью цифрового холловского магнитометра ЦХМ-02. Измерения имели качественный характер и позволяли определить факт наличия спонтанной намагниченности в исследуемом образце. Для измерений спектров поглощения  $L(f)$  использовалась установка, состоящая из генератора качающейся частоты, широкополосной микрополосковой линии, работающей в режиме бегущей волны, и панорамного измерителя коэффициента стоячей волны напряжения Р2-61 в диапазоне частот  $3.2 \div 5.6$  ГГц. Эксперимент проводили при комнатной температуре.

Нами были проведены исследования спонтанной намагниченности, а также получены спектры поглощения СВЧ-энергии и установлены зависимости величины максимального поглощения энергии электромагнитного поля в спектрах ТР от  $x$ . Полученные данные позволили выделить 4 группы ТР, каждую из которых характеризуют особенности кристаллической структуры, наличие или отсутствие спонтанной намагниченности, величина максимального поглощения СВЧ-энергии. Наибольший интерес представляют ТР II-й группы: концентрационный фазовый переход (ФП) здесь сопровождается появлением спонтанной намагниченности и большими величинами максимального поглощения энергии (до  $-30$ – $-36$  Дб). Для этих же ТР, но из области концентрации  $0 \leq x \leq 0.15$  характерны небольшие потери энергии (до  $-4$ – $-6$  Дб) и отсутствие спонтанной намагниченности.

Анализ полученных данных показывает, что в ТР с достаточно высокой концентрацией РЗЭ, ионы которых обладают наибольшим спином (II и III группы), возникают моноклинные фазы. Понижение симметрии сопровождается появлением спонтанной намагниченности и резким усилением эффекта поглощения СВЧ-энергии лишь в ТР с участием РЗЭ II группы. По-видимому, описанные явления могут быть связаны с магнитными ФП, обусловленными разрушением пространственной модулированной структуры. Однако, чтобы более точно ответить на этот вопрос следует продолжить исследования в данной области. Установленные закономерности полезны при конструировании и исследовании материалов на основе феррита висмута.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 08-0201013-а.*

1. Вербенко И.А., Сб-к матер. VII Межд. науч.-технич. конф. «Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения» (INTERMATIC–2009), Москва, МИРЭА: ЦНИИ «Электроника», 126-131 (2009)

**МАГНИТООПТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
СПИН-ОРИЕНТАЦИОННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПЕРВОГО РОДА,  
ИНДУЦИРОВАННОГО МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ, В ФЕРРОБОРАТЕ  $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$**

*Пащенко М.И.<sup>1\*</sup>, Бедарев В.А.<sup>1</sup>, Безматерных Л.Н.<sup>2</sup>, Темеров В.Л.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина, г. Харьков, Украина

<sup>2</sup>Институт общей физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, Россия

E-mail: p.marina1984@gmail.com

Тригональный ферроборат  $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$  – антиферромагнетик с  $T_N = 30$  К, проявляющий свойства мультиферроика [1]. Согласно нейтронным данным [2] в этом соединении ниже 13.5 К существует несоразмерная магнитная фаза. Ниже 13 К в магнитном поле  $\mathbf{H} \parallel C_2$  в кристалле  $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$  наблюдается спин-ориентационный фазовый переход первого рода [1].

Целью данной работы было исследование спин-ориентационного фазового перехода первого рода в ферроборате  $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$  путём изучения полевых зависимостей оптического двуупреломления  $\Delta n(H)$  на длине волны  $\lambda = 633$  нм в геометрии опыта  $\mathbf{H} \parallel C_2$  и  $\mathbf{k} \parallel C_3$ .

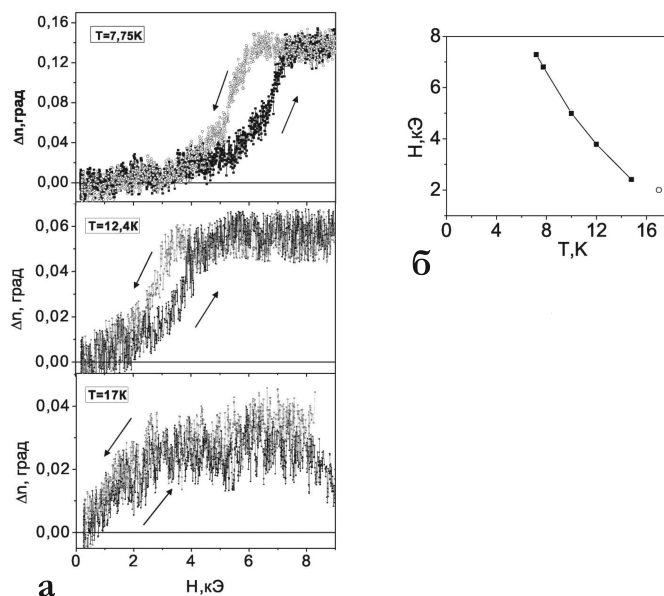


Рис. 1. а) – полевые зависимости линейного двуупреломления света при температурах 7.75 К, 12.4 К, 17 К; б) – магнитная фазовая  $H - T$  диаграмма ■ – точки соответствуют фазовому переходу первого рода; ○ – точка соответствует фазовому переходу второго рода

На рис. 1а представлены полевые зависимости двуупреломления света при температурах 7.5 К, 12.4 К и 17 К. Скачок на кривых  $\Delta n(H)$  соответствует спин-ориентационному фазовому переходу первого рода. С ростом температуры происходит уменьшение величины  $\Delta n(H)$  и смещение магнитного гистерезиса в область меньших магнитных полей. А при температуре 17 К спин-ориентационный фазовый переход уже является фазовым переходом второго рода. Полученные экспериментальные данные позволили определить поля фазового перехода при различных температурах и построить фазовую  $H - T$  диаграмму (рис. 1б).

1. Волков Д.В., Демидов А.А., Колмакова Н.В., ЖЭТФ, **131**, 1030 (2007)

2. M. Janoschek, P. Fisher, J.Scheff et al., arXiv:1001.1784v1 (1010)

**ВЛИЯНИЕ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ  
НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ  
 $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$  ( $x = 0.55-0.75$ )**

*Пинигина К.С.\*, Филиппов А.Л., Хейфец О.Л.*

Уральский государственный университет им А.М.Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ksenechka66@gmail.com

При исследовании электрических свойств существенное влияние на экспериментальные результаты оказывают процессы, происходящие на границе электрод-образец. Метод импедансной спектроскопии (изучение комплексного сопротивления при разных частотах) позволяет получить данные как об электрических свойствах самого изучаемого материала, о его однородности, так и о влиянии электродов, вкладах разных фаз в электрофизические свойства материала и т.п. [1].

Настоящая работа посвящена исследованию электрических свойств аморфных соединений  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$  ( $x = 0.55-0.75$ ) при давлениях 15 – 45 ГПа. При нормальном давлении эти соединения являются электронно-ионными проводниками [2].

Для генерации давлений до 45 ГПа использовали камеру высокого давления с наковальными типа «закругленный конус-плоскость» из искусственных поликристаллических алмазов «карбонадо» [3]. Электрические свойства образцов исследовались методом импедансной спектроскопии с помощью измерителя-анализатора RLC в области частот 1 – 200 кГц при температуре 300 К.

На Рис.1. приведены типичные барические зависимости действительной части импеданса (сопротивления) и тангенса угла диэлектрических потерь (b) для образца с  $x = 0.65$ . Видно, что в определенной области давлений происходит резкое изменение барических зависимостей как сопротивления, так и тангенса угла диэлектрических потерь.

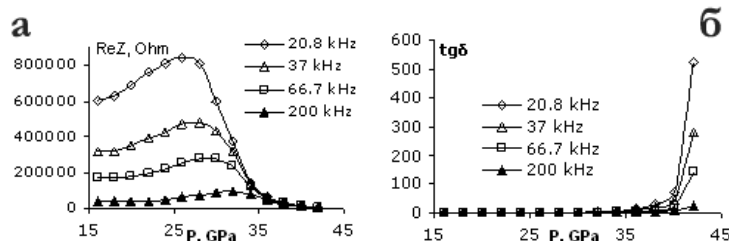


Рис. 1. Барические зависимости сопротивления и тангенса угла диэлектрических потерь (b) для халькогенида  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$  ( $x=0.65$ )

**В результате проведенных исследований было обнаружено:**

1. В соединениях  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$  ( $x = 0.55-0.75$ ) наблюдаются существенные изменения электрических свойств (меняется поведение сопротивления, ёмкости, тангенса угла диэлектрических потерь) в области давлений 26 – 38 ГПа в зависимости от концентрации меди.
2. Происходящие изменения, возможно, связаны с фазовыми переходами.
3. С ростом концентрации меди область существенных изменений электрических свойств смещается в сторону более низких давлений.

*Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы и гранта РФФИ 09-02-01316-а.*

1. Укше Е.А., Букун Н.Г. Твёрдые электролиты. – М.: «Наука» (1977)
2. О.Л. Хейфец, Н.В. Мельникова, А.Л. Филиппов, К.С. Пинигина. Сборник трудов 13-го симпозиума «ОМА-2010», 09-15 сентября, Ростов на Дону – пос. Лоо, Т.II, с.219
3. Верещагин, Л.Ф., Яковлев Е.Н., Степанов Т.Н., Бибаев К.Х., Виноградов Б.В. Письма в ЖЭТФ, **16**, 4, 240 (1972)

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
НЕРАВНОВЕСНОЙ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ  
НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА  
МЕТОДОМ КОРОТКОВРЕМЕННОЙ ДИНАМИКИ**

*Поспелов Е.А.\* , Прудников П.В.*

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

\*E-mail: posgen@rambler.ru

Известно, что дефекты структуры могут существенно модифицировать поведение систем при фазовых переходах и индуцировать новые сложные явления. Представления теории фазовых переходов, хорошо разработанные для однородных систем, претерпевают сильные изменения при попытках их распространения на системы со структурным беспорядком. Так, до сих пор остался невыясненным вопрос: являются ли такие характеристики критического поведения как критические показатели универсальными, т.е. независимыми от концентрации дефектов структуры вплоть до порога перколяции, или осуществляется непрерывное изменение критических показателей с концентрацией.

Данная работа посвящена исследованию одновременного влияния эффектов нарушения пространственной трансляционной симметрии системы, создаваемых присутствием дефектов структуры, и эффектов нарушения временной трансляционной симметрии, обусловленных неравновесными начальными условиями системы, на характеристики аномально медленного неравновесного критического поведения ферромагнетика. Гамильтониан неупорядоченной модели Изинга есть:  $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \alpha_i \alpha_j S_i S_j$ , где  $\alpha_i$  — характеризуют наличие в  $i$ -узле спина.

Для исследования релаксации данной системы была использована глауберовская динамика опрокидывания спина, реализуемая посредством алгоритма Метрополиса. После выбора случайным образом узла решетки, производилось изменение его спина. Если это изменение уменьшало энергию системы, то новая конфигурация принималась, иначе новая конфигурация принималась с вероятностью  $\sim e x p(-\frac{\Delta E}{kT})$ , где  $\Delta E$  — изменение энергии системы.

Для получения критических индексов в данной работе был применён метод коротковременной динамики (МКД). Он основан на проявлении универсального критического поведения уже на начальных этапах эволюции системы после некоторого микроскопического временного масштаба. Главная особенность МКД заключается в том, что информация о характеристиках критического поведения может быть получена из анализа ранней стадии эволюции системы в критической точке или её окрестности [1,2].

Было получено значение динамического критического индекса  $\theta^1 = 0.157(18)$ , характеризующего возрастание намагниченности на начальном этапе эволюции неупорядоченного ферромагнетика:  $M(t) \sim t^{\theta^1}$ .

Сопоставление полученных значений критических индексов для сильно неупорядоченной системы с концентрацией спинов  $p = 0.6$  со значениями, полученными в [3] для слабо неупорядоченных систем с  $p = 0.95$  и  $p = 0.8$ , показывает, что критическое поведение данных систем относится к различным классам универсальности.

*Работа поддержана грантами Министерства образования и науки РФ 2.1.1/930 и 02.740.11.0541, грантами РФФИ 10-02-00507, 10-02-00787 и грантом Президента РФ МК-3815.2010.2.*

1. Janssen H.K., Schaub B., Schmittmann B., Z. Phys. B, **73**, 539 (1989).
2. Zheng B., Int. J. Mod. Phys. B, **12**, 1419 (1998).
3. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Pospelov E.A., et.al., Phys.Rev. E, **81**, 011130 (2010).

**ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ВСКИПАНИЯ ПЕРЕГРЕТОЙ ЖИДКОСТИ  
И ФЛУКТУАЦИОННЫХ ЦЕНТРОВ С ПОМОЩЬЮ ВИДЕОСЪЁМКИ***Свитова К.В.<sup>1</sup>, Липнягов Е.В.<sup>2\*</sup>, Ермаков Г.В.<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Уральский государственный университет им А.М.Горького, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: e1\_ru@e1.ru

Видеонаблюдения вскипания перегретой жидкости [1,2] дают большое количество информации о характере вскипания перегретой жидкости и тех флуктуационных центров, на которых она вскипает.

В предлагаемом докладе представлены результаты обработки экспериментальных данных видеонаблюдений вскипания перегретого н-пентана при температурах  $T = 146.0\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T = 146.2\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $T = 146.6\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

Получены распределения флуктуационных центров по числу вскипаний и распределение флуктуационных центров, на которых имело место количество вскипаний, превышающее некоторое заданное число  $m$  ( $m > 1$ ), от числа  $m$ .

Сделана приближенная оценка возможной температуры для гомогенной границы перегрева с использованием классической теории зародышеобразования.

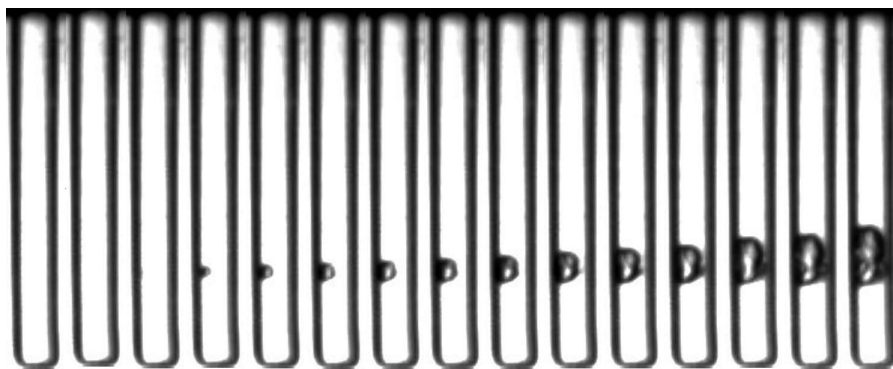


Рис. 1. Образование зародышей в перегретой жидкости, н-пентан,  $T = 120\text{ }^{\circ}\text{C}$ , частота 7400 кадров в секунду

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 10-08-00540а.*

1. Ермаков Г.В., Липнягов Е.В., Гурашкин А.Л., Перминов С.А., Письма в журнал технической физики, **35**, 23, 70-76 (2009)
2. Ermakov G.V., Lipnyagov E.V., Perminov S.A., Gurashkin A.L., J.Chem.Phys., **131**, 031102 (2009)

## ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ (Pt, Fe, Pb, Ni, V)

*Суханова Г.В.\**, *Суханов И.В.*

Уральский государственный университет им А.М.Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: SuhanovaGalina@yandex.ru

Цель работы – исследование влияния высоких давлений на формирование метастабильных состояний непосредственно в процессе высоких пластических деформаций на примере платины, железа и свинца. Для повышения механических свойств металлов их термически или механически упрочняют, т.е. изменяют микроструктуру. Возникающие структуры метастабильны, со временем стремятся к равновесному состоянию, и металл теряет свои прочностные характеристики. Чем больше различие между метастабильным и равновесным состояниями, тем заметнее со временем будет изменение свойств металла.

Термоэдс является структурно-чувствительной характеристикой металлов. Исследование её непосредственно в процессе высоких пластических деформаций позволяет выявить изменение микроструктуры, формирование метастабильного состояния и кинетику этого процесса.

Для создания высоких давлений использована камера высокого давления с синтетическими поликристаллическими алмазами типа «карбонадо», позволяющая исследовать электрические характеристики образцов непосредственно в процессе воздействия сверхвысоких давлений [1]. Установка позволяет одновременно регистрировать создаваемое усилие, температуры наковален и электрический сигнал от образца. В качестве образцов использованы фольги исследуемых металлов (толщина исходного материала около 0.1 mm). После обработки давлением область, подверженная сжатию, имеет диаметр 0.2 мм и толщину около 20 мкм.

*Платина.* Выбор материала обусловлен тем, что платина и сплавы на её основе сохраняют высокую пластичность в широком диапазоне давлений, температур и деформаций. При повышении нагрузки термоэдс платины монотонно возрастает, при снижении – уменьшается. Время релаксации термоэдс практически не меняется с увеличением давления и составляет ~ 20 с.

*Железо.* Изучению фазового состава железа при статических давлениях и ударных нагрузках посвящено значительное число работ [3-5]. В проведённых исследованиях величины давления переходов различны, что объясняется степенью чистоты материала и методическими особенностями нагружения.

*Никель.* При 23 ГПа существует особенность поведения электросопротивления никеля при ударном нагружении. Для чистого никеля барическая зависимость ТЭДС линейна во всем диапазоне давлений, но при 24 ГПа происходит изменение угла наклона этой прямой, что коррелирует с данными по ударному нагружению.

*Ванадий.* Интересен особенностью протекания фазового перехода при давлении 96 ГПа. Зависимость термоэдс ванадия от времени неэкспоненциальна во всем диапазоне давлений. В результате исследований обнаружено, что ТЭДС ванадия зависит от приложенного давления, причем в разных барических интервалах эти зависимости различны.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке гранта РФФИ №10-02-96036-р\_урал.*

1. Vereshchagin G.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. Minshall F.S., Phys.Rev., **98**, 271 (1955)
3. Takahashi T., Bassett W.A., Science, **145**, 483-485 (1964)
4. Saxena S.K., et al., Science, **269**, 1703-4 (1995)
5. Andrault D., Fiquet G., Kunz M. et. al., Science, **278**, 831-4 (1997)



**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СИМУЛЯЦИИ РЕДКИХ СОБЫТИЙ  
ВЫБОРКИ ПЕРЕХОДНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ С ОБМЕНОМ ПУТЕЙ (TIS-Swap)  
ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И КАВИТАЦИИ  
ПЕРЕОХЛАЖДЁННОЙ ЖИДКОСТИ**

*Тетерин А.С.\**

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: vesahon@gmail.com

Компьютерное моделирование играет важную роль в изучении фазовых переходов, но оно ограничено доступной частотой. Для изучения редких событий применяются разные методы, один из которых — Transition Interface Sampling (выборка переходных поверхностей) был применён нами к проблемам кристаллизации и кавитации переохлаждённой леннард-джонсовской жидкости. Этот метод позволил измерить недоступные прямым методом частоты и собрать ансамбли реакционных путей, после чего эти ансамбли путей были проанализированы.

Исследуемые модели содержали 10000 частиц для кавитации и 10768 для кристаллизации, помещённые в кубическую ячейку с периодическими граничными условиями. Параметры потенциала Леннард-Джонса  $\sigma = 0.3405$ ,  $\epsilon/k_B = 119.8$  К (параметры аргона), где  $k_B$  — постоянная Больцмана. Значения  $\sigma$ ,  $\epsilon$ ,  $k_B$  и масса частицы  $m = 6.6336 \cdot 10^{-26}$  кг использовались в качестве безразмеривания термодинамических величин. Расчёты проводились в NVE ансамбле. При интегрировании уравнений движения использовался алгоритм Бимона. Шаг интегрирования уравнений по времени составлял  $\tau = 5 \cdot 10^{-15}$  с. Радиус обрезания потенциала межчастичного взаимодействия составлял  $r_c = 6.3\sigma$ . Вычисления проводились модифицированной мною для применения метода TIS программой HOOMD-0.9, которая проводила вычисления на видеокартах от NVIDIA что ускорило работу в несколько десятков раз.

В качестве кристаллического и кавитационного параметров порядка была использована оригинальная процедура.

Расчёты начинались из стабильной области. Были собраны ансамбли реакционных путей и измерены частоты для кавитации и нуклеации при температуре 0.4 и плотностях от 0.85 до 0.875, всего 13 точек, а также по две для кавитации при температурах 0.5 и 0.7. Показано, что кривые частот кавитации и кристаллизации пересекаются. Проанализированы ансамбли реакционных путей и показано, что благодаря применению метода TIS возможно изучение процесса и получение его частоты в случае, если другой процесс в том же состоянии имеет во много раз большую вероятность.

Программа, использованная для симуляции методом TIS-Swap, пригодна для симуляции и других систем.

## ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ И МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ $\text{NH}_4\text{I}$ ПРИ ВЫСОКИХ ЯВЛЕНИЯХ

*Тихомирова Г.В.\**, *Тебеньков А.В.*, *Волкова Я.Ю.*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: Galina.Tikhomirova@usu.ru

Цель данной работы — изучение влияния высоких давлений до 50 ГПа на электропроводность и магнетосопротивление иодида аммония  $\text{NH}_4\text{I}$ , определение условий и характерных времен формирования различных фаз высокого давления в зависимости от времени обработки давлением и различной последовательности его приложения. Сравнение с ранее исследованными галогенидами аммония  $\text{NH}_4\text{X}$  ( $\text{X} = \text{Fe}, \text{Cl}, \text{Br}$ ).

Ранее обнаружено, что в галогенидах аммония  $\text{NH}_4\text{X}$  ( $\text{X} = \text{Fe}, \text{Cl}, \text{Br}$ ) критические давления перехода  $P_C$  из низкоомного в высокоомное состояние не зависят от предыстории образца, коррелируют с расстоянием анион-катион и составляют 40, 25–27 и 15 ГПа, соответственно, для  $\text{NH}_4\text{F}$ ,  $\text{NH}_4\text{Cl}$  и  $\text{NH}_4\text{Br}$  [1-2]. При исследовании проводимости иодида аммония  $\text{NH}_4\text{I}$  обнаружен аналогичный переход в области давлений 8–10 ГПа.

Критические давления переходов в галогенидах аммония проанализированы с помощью уравнений состояния (Шлоссера, Феранте и Виннета [3]; Берча [4-5]). Установлено, что величина критического давления  $P_C$  обратно пропорциональна расстоянию анион-катион. Оказалось, что при критических давлениях расстояние между галогеном и ионом аммония становится сравнимым с ионным радиусом галогена. Это позволяет предположить, что переход в проводящее состояние связан с обобществлением водородных связей аммония. Линейная зависимость критического давления от расстояния анион-катион в исследованных галогенидах аммония показывает, что в данных материалах, по-видимому, имеет место один и тот же тип структурных превращений.

Обнаружено, что свойства галогенидов аммония, существенно зависят от времени обработки давлением и барической предыстории образца. Определено время первоначальной обработки давлением, необходимое для стабилизации низкоомного состояния образцов  $\text{NH}_4\text{X}$ , различное для разных галогенидов аммония. Иодид аммония переходил в проводящее состояние при давлениях ниже 8 ГПа. Установлена корреляция времени обработки и величины критического давления с ионным радиусом галогенов F, Cl, Br, I.

При исследовании проводимости и магнетосопротивления  $\text{NH}_4\text{I}$  кроме вышеуказанного перехода при 8–10 ГПа обнаружены также особенности на барической зависимости сопротивления в области 20–35 ГПа. Приложение поперечного магнитного поля (до 1 Тл) несколько сглаживает эти особенности и изменяет вид барического гистерезиса. Наблюдается отрицательное магнетосопротивление.

*Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ № 09-02-01316 и 10-02-96036-р\_урал и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.*

1. Tikhomirova G.V., Babushkin A.N., Stat. sol. (b), **235**, 2, 337 (2003)
2. Tikhomirova G.V., Babushkin A.N., Phys. stat. sol. (b), **244**, 1, 424 (2007)
3. Бацанов С.С., Структурная химия. Факты и зависимости, Диалог-МГУ, Москва, (2000)
4. Балагуров А.М., Козленко Д.П., Савенко Б.Н., Глазков В.П., Соменков В.А., ФТТ, **40**, 1, 142 (1998)
5. Balagurov A.M., Savenko B.N., Kozlenko D.P. et al., Physica B, **265**, 92 (1999)

## ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$ ( $x = 0.7, 0.75$ )

Турутина Е.А.\* , Хейфец О.Л.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: eturutina@rambler.ru

Работа посвящена изучению влияния нестехиометрии и легирования ионами меди на электрические свойства соединения  $\text{AgGeAsSe}_3$ . Выбор легирующего элемента обусловлен тем, что соединения  $\text{AgGeAsSe}_3$  [1, 2] и  $\text{CuGeAsSe}_3$  являются электронно-ионными проводниками с низкой температурой начала ионного переноса.

Синтезированы и аттестованы многокомпонентные халькогениды  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$ ,  $x = 0.7$ ,  $x = 0.75$ , полученные из соединения  $\text{AgGeAsSe}_3$  заменой части атомов серебра на атомы меди. Синтезированные соединения являются аморфным, на дифрактограммах наблюдаются гало в одних и тех же областях углов. Стеклообразные соединения были получены закалкой путём погружения ампул с расплавом в ледяную воду от температуры  $880^\circ\text{C}$ . Электрические свойства соединений  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$ ,  $x = 0.7, 0.75$  исследовали методом импедансной спектроскопии в интервале температур  $78\text{ K}–400\text{ K}$ . Измерения импеданса проводили с помощью измерителя-анализатора импеданса RCL-2000 в области частот  $0.2–200\text{ kHz}$ .

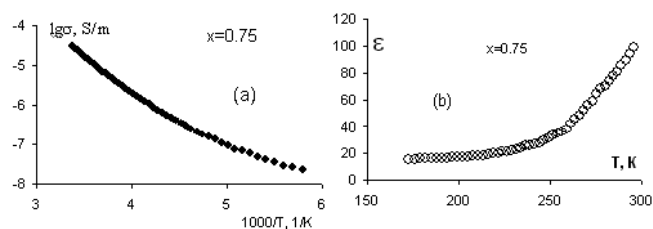


Рис. 1. Температурные зависимости электропроводности (а) и диэлектрической проницаемости (б)  $\text{Cu}_{0.25}\text{Ag}_{0.75}\text{GeAsSe}_3$

Для исследованных материалов характерно наличие двух хорошо разделяющихся областей на частотной зависимости импеданса: высокочастотной, характеризующей свойства образца, и низкочастотной, характеризующей влияние электродного импеданса; граничная частота, разделяющая эти области, увеличивается с повышением температуры. Температурные зависимости электропроводности и диэлектрической проницаемости типичны для ионных проводников [3] (см. Рис.1). Исследование зависимости сопротивления от времени при постоянной разности потенциалов в ячейке с графитовыми электродами позволило оценить ионную составляющую проводимости (70–80%) и время поляризации (500–1000 с) в зависимости от содержания атомов меди.

Выводы:

1. Замена части атомов серебра в соединении  $\text{AgGeAsSe}_3$  на атомы меди приводит к уменьшению полной проводимости (электронной и ионной), снижению доли ионного компонента проводимости, повышению температуры начала заметного ионного переноса и увеличению времени релаксации на порядок.

2. Области температур начала ионного переноса, доли ионного переноса и времени релаксации для  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{GeAsSe}_3$  с  $x = 0.7$  и  $x = 0.75$  близки друг к другу.

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

1. Е.Р. Баранова и др. Патент РФ № 2066076. Резистивный материал (1996)

2. В.Б. Злоказов, Н.В. Мельникова, Е.Р. Баранова, М.В. Перфильев, Л.Я. Кобелев, *Электрохимия*, **28**, 10, 1523-1530 (1992)

3. Е.А. Укше, Н.Г. Букун. «Твёрдые электролиты», – Москва, «Наука» (1977)

## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДАВЛЕНИЯ НА СОПРОТИВЛЕНИЕ ИОННОГО ПРОВОДНИКА $\text{AgGeAsS}_3$

*Филиппов А.Л.\* , Истомин А.И.*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия  
E-mail: afilippov@bk.ru

Развитие современной техники требует новых источников электрической энергии — аккумуляторов, топливных элементов. Одним из перспективных направлений является использование в качестве электродов таких устройств веществ с высокой долей ионной проводимости. Высокие давления влияют на температуру начала ионного переноса в соединениях, поэтому необходимо знать, в каких областях давлений у ионных проводников ещё существует ионная проводимость, а в каких уже нет.

В настоящей работе проведены исследования сопротивления  $\text{AgGeAsS}_3$  при высоких давлениях и низких температурах с целью определения области существования ионной проводимости при высоких давлениях. Соединение  $\text{AgGeAsS}_3$  при нормальном давлении является ионным проводником с областью температур начала ионного переноса 120 К–150 К и долей ионного переноса 99.7% [1].

Давления создавали с помощью камеры высокого давления (КВД) с алмазными наковальнями типа «закругленный конус — плоскость», изготовленными из синтетических поликристаллических алмазов «карбонадо» [2]. Наковальни хорошо проводят электрический ток и могут быть использованы в качестве электрических контактов к образцу. Сопротивление короткозамкнутых наковален (~10 Ом) слабо меняется с температурой. Погрешность определения давления не превышает 10% в области давлений 10–45 ГПа. Используемая методика позволяет изучать один и тот же образец при последовательном увеличении и снижении давления, выдерживать длительное время под нагрузкой. Исследованные образцы, полученные сжатием в КВД, имели диаметр ~0.2 мм и толщину 10–30 мкм.

Были исследованы температурные зависимости сопротивления  $\text{AgGeAsS}_3$  в области температур 78 К–400 К при давлениях 15 ГПа — 45 ГПа. Получен активационный ход электросопротивления в диапазоне давлений до 37 ГПа. Из исследований температурной зависимости сопротивления определена область температур начала ионного переноса в соединении при разных давлениях. Исследован гистерезис сопротивления при нагружении и снятии нагружения с образца (сопротивление при снятии нагружения меньше, чем при нагружении). Определены барические области существования в образце фазовых переходов. Исследована временная релаксация сопротивления (изменение величины сопротивления при увеличении нагрузки от одного давления до другого) во всем исследуемом диапазоне давлений.

В результате исследований сделаны выводы:

1. Соединение обладает ионной проводимостью при давлениях до 35 ГПа. Область температуры начала ионного переноса зависит от давления немонотонно.
2. Временная релаксация сопротивления слабая, сопротивление меняется не более чем на 2–3 % от первоначального значения в области давлений до фазового перехода.

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

1. Baranova E.R., Kobelev V.L., Kobeleva O.L. et al., Solid State Ionics, **124**, 255-261 (1999)
2. Верещагин Л.Ф., Яковлев Е.Н., Степанов Т.Н., Бибаев К.Х., Виноградов Б.В., Письма в ЖЭТФ, **16**, 4, 240 (1972)

**ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  $(\text{PbSe})_{0.8}(\text{AgAsSe}_2)_{0.2}$   
ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ**

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

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: olga.kobeleva@usu.ru

В рамках поиска материалов, сочетающих ионную проводимость с сегнетоэлектрическими свойствами были синтезированы халькогениды  $(\text{PbSe})_x(\text{AgAsSe}_2)_{1-x}$  ( $x = 0.7-0.9$ ) и исследованы их электрические свойства при разных внешних воздействиях. Данная работа посвящена исследованию электрических свойств образца с  $x = 0.8$  при высоких давлениях (15 ГПа–45 ГПа), низких температурах (78 К–350 К) и в магнитных полях (0.1 Т–1 Т).

По данным рентгеноструктурного анализа, синтезированный материал представляет собой смесь двух фаз – PbSe и AgAsSe<sub>2</sub>. Измерения проводились на порошкообразных образцах.

Для генерации давлений до 48 ГПа использовали камеру высокого давления с наковальнями типа «закруглённый конус – плоскость» из искусственных поликристаллических алмазов «карбонадо» [1]. Сопротивление на постоянном токе измерялось по падению напряжения на образце, измерение комплексного сопротивления производилось в диапазоне частот 1 кГц–200 кГц.

При нормальном давлении образец проявляет сегнетоэлектрические свойства с температурой Кюри в области ~200 К. Электропроводность полупроводникового типа, в области температур 190–210 К происходит смена энергии активации.

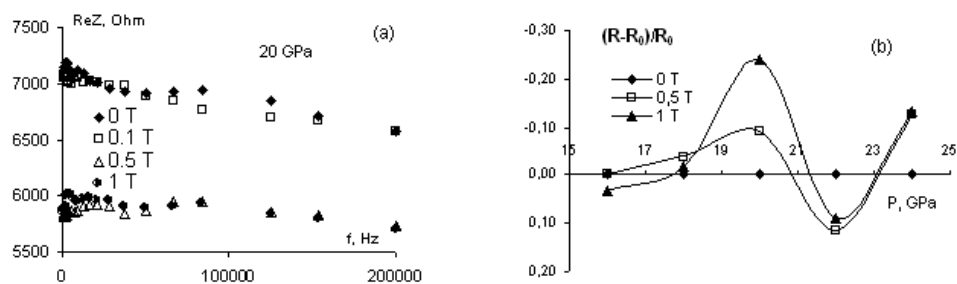


Рис. 1. Барические зависимости сопротивления от частоты (а) и относительного изменения сопротивления в магнитных полях (б)

Сопротивление образца с ростом давления уменьшается, слабо зависит от частоты (см. Рис. 1а). Сопротивление при снятии нагрузки в несколько раз больше, чем сопротивление до нагружения. В области давлений около 20 ГПа в образце наблюдаются существенные изменения электрических свойств, что явно видно из зависимостей относительного изменения сопротивления в магнитном поле (см. Рис. 1б), причем области максимума и минимума одинаковы для всего исследованного диапазона величины магнитного поля.

По результатам исследований были сделаны следующие выводы:

1. В образце  $(\text{PbSe})_{0.8}(\text{AgAsSe}_2)_{0.2}$  имеется частично обратимый фазовый переход в области давлений 18–22 ГПа. По сравнению с образцом  $\text{AgPbAsSe}_3$  область фазового перехода смещается в сторону более низких давлений.

2. Магнитное поле не оказывает заметного влияния на электрические свойства  $(\text{PbSe})_{0.8}(\text{AgAsSe}_2)_{0.2}$  в области давлений до 18 ГПа и после 26 ГПа.

*Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы и гранта РФФИ 10-02-96036.*

1. L.F. Vereshchagin, E.N. Yakovlev, B.V. Vinogradov, G.N. Stepanov, K.Kh. Bibaev, T.I. Alaeva., V.P. Sakun. High Temperatures – High Pressures, **6**, 499 (1974)

**ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ  
ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ И ПРОЦЕССОВ ЭКРАНИРОВАНИЯ  
В МОНОКРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ И ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ  
ПРИ ПОВЫШЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ**

*Чезганов Д.С.\* , Ахматханов А.Р., Батулин И.С., Шур В.Я.*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: dmit.chezganov@gmail.com

В настоящее время сегнетоэлектрические монокристаллы активно применяются в различных областях техники, так как они обладают уникальным набором физических свойств (пьезо- и пироэлектрических, диэлектрических, нелинейно-оптических), которые взаимосвязаны между собой, а также зависят от внешних воздействий. Кристаллы семейства ниобата лития  $\text{LiNbO}_3$  (LN) и танталата лития  $\text{LiTaO}_3$  (LT) представляют интерес для нелинейно-оптических и электрооптических применений с применением методов доменной инженерии (управление свойствами материалов за счёт создания сегнетоэлектрических доменных структур с заданными параметрами).

В данной работе было проведено исследование особенностей кинетики доменной структуры и процессов экранирования в монокристаллах ниобата лития и танталата лития различного состава и легированных  $\text{MgO}$  при температурах в диапазоне от комнатной до  $350^\circ\text{C}$ , который является наиболее актуальным с практической точки зрения для создания периодически поляризованных кристаллов для нелинейно-оптических преобразователей длины волны лазерного излучения. Эти данные также необходимы для проведения компьютерного моделирования экспериментально наблюдаемых эффектов самоорганизованного роста нанодоменных структур в сильнонеравновесных условиях переключения.

Исследование кинетики доменной структуры проводилось путём прямой визуализации серии мгновенных доменных конфигураций с одновременной записью тока переключения с использованием жидких (для низких температур) и твердотельных электродов. Было показано, что пороговые поля для первого переключения поляризации из монодоменного состояния уменьшаются в 2–4 раза при увеличении температуры от комнатной до  $250^\circ\text{C}$ .

Объёмная проводимость, как один из возможных процессов объёмного экранирования, была измерена в диапазоне температур от комнатной до  $350^\circ\text{C}$ . Показано, что легирование конгруэнтного ниобата лития 5моль% $\text{MgO}$  приводит к 20–50 кратному возрастанию объёмной проводимости при той же энергии активации (1100 эВ). Обнаружено, что формирование заряженных доменных стенок при переключении приводит к увеличению проводимости на 3–4 порядка с существенной анизотропией (несимметричная вольт-амперная характеристика). Изучена релаксация аномальной проводимости со временем после остановки процесса переключения. Наблюдаемое возрастание проводимости при повышенных температурах является наиболее вероятной причиной уменьшения временной константы объёмного экранирования.

Впервые обнаружено качественное изменение формы изолированных доменов при увеличении температуры – переход от роста многоугольников к изотропному росту. Высказано предположение, что полученный эффект вызван переходом от детерминированного зародышеобразования к стохастическому при переходе от анизотропной прыжковой проводимости к изотропной ионной. Впервые показана возможность роста дендритной доменной структуры. Продемонстрирован предсказанный эффект аномального увеличения шероховатости доменных стенок при переходе в режим стохастического зародышеобразования.

*Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты 08-02-12173-офи, 08-02-99082-р-офи); РФФИ-НЦНИ (грант 05-02-19648); программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России 2009-2013»; Федерального агентства по образованию (контракты П870 и П2127); и Федерального агентства по науке и инновациям (контракты 02.74011.0171 и 02.552.11.7069).*

## ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ СИСТЕМЫ Ag-Sn-Sb-Se ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Шакиров Э.Ф.\*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: shakirov.eldar@gmail.com

Электрические свойства соединений с высокой долей ионной проводимости открывают широкие возможности для решения ряда задач современного приборостроения (создание на их основе химических источников тока, аналитических датчиков различного назначения, радиоэлектронных элементов, удовлетворяющих требованиям миниатюризации электронной аппаратуры и др.). Актуальной является задача поиска новых кристаллических и аморфных соединений с проводимостью по ионам  $\text{Ag}^+$ , т.к. их можно применять в широком интервале частот, температур и давлений [1].

Целью данной работы было синтезировать сложные халькогениды  $(\text{SnSe})_x(\text{AgSbSe}_2)_{1-x}$  ( $x = 0.3, 0.5, 0.7$ ) и изучить влияние температуры и давления на их электрические свойства. Исследования таких соединений при высоких давлениях представляет интересную задачу, поскольку приложение давления приводит к принципиальным изменениям электрических свойств соединений и появлению фазовых переходов.

Для генерации давлений до 50 ГПа использовали камеру высокого давления с наковальнями типа «закруглённый конус – плоскость» из искусственных поликристаллических алмазов «карбонадо» [2]. Эти наковальни, вследствие особенностей синтеза, обладают хорошей проводимостью и могут быть использованы в качестве электродов к образцу. Электрические свойства полученных образцов исследовались с помощью измерителя-анализатора импеданса в области частот 1–200 кГц методом импедансной спектроскопии.

Из температурных исследований данных соединений было установлено наличие фазового перехода сегнетоэлектрического типа, как и в стехиометрическом соединении  $\text{AgSnSbSe}_3$  [3]. Определены температурные границы перехода.

Из исследований при высоких давлениях получены и проанализированы годографы импеданса, барические зависимости сопротивления и тангенса угла диэлектрических потерь для образца с  $x=0.3$  (образцы с  $x=0.5$  и  $0.7$  являются предметом дальнейших исследований). Обнаружены области давлений, в которых происходит падение электросопротивления соединений на порядок.

В результате проделанной работы соединения успешно синтезированы, для образца с  $x=0.3$  определены электрические свойства при нормальном давлении при температурах 130–340 К, а также при комнатной температуре в области давлений 16–48 ГПа, обнаружены особенности: температурные границы фазового перехода сегнетоэлектрического типа – 280–320 К, переход соединений в низкоомное состояние в областях, представленных в таблице.

Соединение	Области перехода в низкоомное состояние, ГПа	$\epsilon_{\text{макс}}$	G, T = 280 K $\omega = 20\text{кГц}$
$(\text{SnSe})_{0.3}(\text{AgSbSe}_2)_{0.7}$	18–22	6000 (T=300 K)	15.4 мс
$(\text{SnSe})_{0.5}(\text{AgSbSe}_2)_{0.5}$	20–24	–	–
$(\text{SnSe})_{0.7}(\text{AgSbSe}_2)_{0.3}$	18–26	–	–

1. Baranova E.R., Kobelev V.L., Kobeleva O.L., Nugaeva L.L., Zlokazov V.B., Kobelev L.Y., Solid State Ionics, **146**, 415-421 (2002)
2. Верещагин Л.Ф., Яковлев Е.Н., ЖЭТФ, **16**, 4, 240 (1972)
3. Хейфец О.Л., Кобелев Л.Я., Мельникова Н.В., Нугаева Л.Л., ЖТФ, **77**, 1, 90-96 (2007)

## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ОХЛАЖДЕНИЯ КОНДЕНСАТОРА НА РАБОЧИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕДЬ-ВОДЯНОЙ КОНТУРНОЙ ТЕПЛОВОЙ ТРУБЫ

*Юшакова С.И.\**, *Вершинин С.В.*, *Майданик Ю.Ф.*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: s.yushakova@gmail.com

Медь-водяные контурные тепловые трубы (КТТ) являются весьма привлекательным объектом для разработки и исследований, поскольку медь и вода относятся к хорошо совместимым и достаточно дешёвым материалам, которые прошли успешную проверку в обычных тепловых трубах. Однако количество работ, касающихся разработки и исследования водяных КТТ, все компоненты которых полностью сделаны из меди, весьма невелико, а полученные результаты, за некоторым исключением, далеки от тех, которые можно было бы отнести к числу высоких.

В Институте теплофизики была разработана медь-водяная КТТ с высокими тепловыми параметрами [1]. Целью настоящей работы являлось исследование влияния температуры охлаждения конденсатора данной КТТ на рабочие характеристики устройства.

Были проведены испытания устройства при охлаждении конденсатора проточной термостатируемой водой с температурой 10, 20, 40, 60 и 80 °С. Обнаружено два режима работы КТТ, характеризующиеся различной динамикой роста температуры испарителя. При первом режиме (до 600 Вт) наблюдается плавный рост температур испарителя с увеличением тепловой нагрузки, причем кривые для различных температур охлаждения расположены эквидистантно. Расстояния между ними соответствуют разнице в температурах охлаждения конденсатора. Второй режим работы КТТ (выше 600 Вт) характеризуется более резким ростом температур испарителя при низких температурах охлаждения конденсатора. Зависимость рабочих температур от температуры стока тепла становится противоположной: чем ниже температура охлаждения конденсатора, тем выше рабочая температура КТТ.

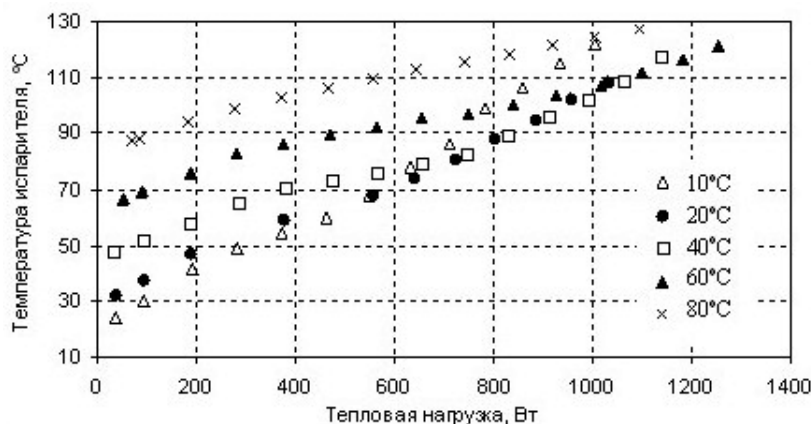


Рис. 1. Зависимость температуры испарителя КТТ от тепловой нагрузки

Максимальная мощность, которую удалось достичь при испытаниях КТТ, составила 1400 Вт при температуре пара, не превышающей 110 °С. Минимальное значение термического сопротивления, равное 0.028 °С/Вт, было получено при тепловой нагрузке около 1094 Вт и температуре охлаждения конденсатора 80 °С.

1. Mайданик Yu., Vershinin S., Proc. of the 15th Int. Heat Pipe Conference, Clemson, USA (2010)



**ПРОВОДИМОСТЬ  
И ТРАНСПОРТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ**



**ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ  $\text{VI}(\text{CR,FE})\text{VOX}$   
С РАЗЛИЧНЫМИ СООТНОШЕНИЯМИ Cr:Fe***Величко Е.В.<sup>1\*</sup>, Буянова Е.С.<sup>1</sup>, Морозова М.В.<sup>1</sup>, Петрова С.А.<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: vasia171@yandex.ru

Сложнооксидные фазы являются основой для материалов, используемых в различных электрохимических устройствах. Тщательное исследование соотношения состав-структура-свойство необходимо для понимания механизмов и закономерностей поведения материалов и последующего целенаправленного их модифицирования. Одним из перспективных соединений для использования в качестве кислородно-ионных проводников с высокими значениями электропроводности при достаточно низких температурах является  $\text{Vi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ . Наилучшими показателями проводимости обладает высокотемпературная  $\gamma$ -модификация данного соединения. Путём замещения ванадия другими металлами удается снизить температуру существования этой модификации. При этом получены материалы с общей формулой  $\text{Vi}_4\text{V}_{2-x}\text{Me}_x\text{O}_{11-\delta}$ , известные как семейство VIMEVOX.

Работа посвящена исследованию влияния на общую электропроводность сложных оксидов  $\text{Vi}_4\text{V}_{2-x-y}\text{Cr}_x\text{Fe}_y\text{O}_{11-\delta}$  ( $x + y \leq 0.7$ ,  $\delta = 0.1$ ) различного соотношения концентраций железа и хрома.

Все образцы синтезировали по стандартной керамической технологии в интервале температур от 600 до 800 °С. Аттестация полученных составов производилась методом РФА.

Электропроводность твердых растворов исследована методом импедансной спектроскопии в диапазоне температур 473–1073 К. Измерения проводились двухконтактным методом с платиновыми электродами на предварительно подготовленных спеченных брикетах. Форма импедансной кривой меняется с изменением температуры. При относительно низких температурах (623 К) годограф состоит из нескольких сочетающихся полуокружностей. С ростом температуры низкочастотная часть всё более сглаживается. Эквивалентные схемы ячеек, соответствующие протеканию процессов в определенном температурном интервале, подбирали с использованием программы Zview software (Version 2.6b, Scribner Associates, Inc.). По результатам импедансных исследований проводимости построены температурные зависимости общей проводимости образцов от обратной температуры. Установлено, что ход зависимостей является характерным для семейства VIMEVOX: до определенной суммарной концентрации допантов проводимость растет, а при больших концентрациях наблюдается заметное снижение электропроводности. Показано, что с ростом величины отношения концентрации железа к концентрации хрома, электропроводность образцов увеличивается.

По результатам данной работы были определены образцы с наибольшей электропроводностью и установлено наилучшее соотношение концентраций хрома и железа при двойном замещении ванадия в ванадате висмута.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».*

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ  $\text{Ni}_3\text{Mn}_x\text{Al}_{1-x}$ Волкова Н.В.<sup>1\*</sup>, Коуров Н.И.<sup>1</sup>, Марченков В.В.<sup>1</sup>, Weber H.W.<sup>2</sup><sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Atominstut, Vienna University of Technology, Vienna, Austria

\*E-mail: nvolkova@imp.uran.ru

В системе тройных ферромагнитных сплавов  $\text{Ni}_3\text{Mn}_x\text{Al}_{1-x}$ , упорядоченных в гранцентрированной кубической  $L1_2$ -структуре, реализуется переход от интерметаллида  $\text{Ni}_3\text{Al}$  к атомно-упорядочивающемуся сплаву  $\text{Ni}_3\text{Mn}$ , который сопровождается изменением степени локализации магнитных моментов в окрестности  $x = 0.15$  [1, 2]. Согласно [2],  $\text{Ni}_3\text{Al}$  преимущественно зонный магнетик со спонтанным магнитным моментом на атомах никеля  $\mu_s^{\text{Ni}} \sim 0.07\mu_B/\text{Ni}$  и достаточно низкой температурой Кюри  $T_C \geq 41.5$  К. В  $\text{Ni}_3\text{Mn}$  магнитные моменты на атомах Ni и Mn максимально локализованы ( $\mu_s^{\text{Mn}} \sim 3.6\mu_B/\text{Mn}$ ,  $\mu_s^{\text{Ni}} \sim 0.3\mu_B/\text{Ni}$ ,  $T_C = 733$  К).

В данной работе исследовано электросопротивление сплавов  $\text{Ni}_3\text{Mn}_x\text{Al}_{1-x}$  при температурах от 4.2 К до 800 К, в магнитных полях до 12 МА/т, вычислены отдельные вклады в электросопротивление:  $\rho_0$  – остаточное электросопротивление,  $\rho_{ph}$  – фононный вклад,  $\rho_m$  – магнитный вклад. Температурные зависимости электросопротивления исследованных сплавов имеют типичный для ферромагнетиков вид с положительным температурным коэффициентом сопротивления (ТКС)  $\frac{1}{\rho_0} \frac{d\rho}{dT}$  (Рис. 1). Обнаружено, что концентрационная зависимость  $\rho_0$  не подчиняется правилу Нордгейма-Курнакова  $\rho_0 \sim x(1-x)$ . Фононный вклад  $\rho_{ph}$  описывается функцией Блоха-Грюнайзена и слабо изменяется с концентрацией.

Наклон полевых зависимостей электросопротивления и знак поперечного магнитосопротивления сплавов  $\text{Ni}_3\text{Mn}_x\text{Al}_{1-x}$  изменяется при добавлении марганца с положительного для  $x = 0$  на отрицательный. Полевые зависимости магнитосопротивления описываются

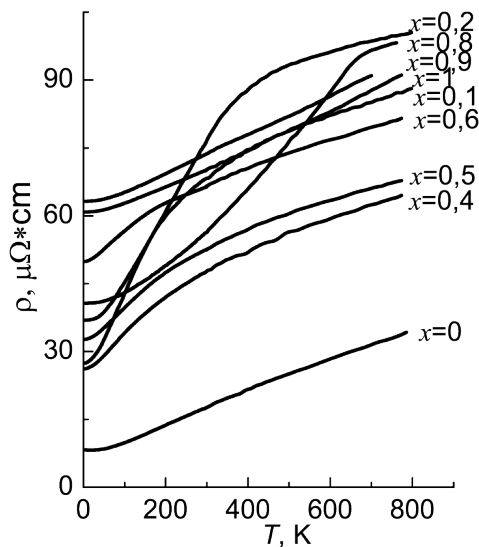


Рис. 1. Температурные зависимости электросопротивления сплавов  $\text{Ni}_3\text{Mn}_x\text{Al}_{1-x}$

линейно-квадратичными функциями. Добавление марганца приводит к изменению наклона температурных зависимостей магнитного вклада в электросопротивление  $\rho_m$ .

Проведённые исследования электрических свойств сплавов  $\text{Ni}_3\text{Mn}_x\text{Al}_{1-x}$  подтвердили предположение о существенной перестройке электронной зонной структуры вблизи поверхности Ферми при переходе от зонных к спин-локализованным магнетикам.

*Данная работа частично поддержана Австрийской Академией Наук.*

1. Kourov N.I., Nazarova S.Z., Korolyov A.V., Volkova N.V., Belozarov E.V., Physics of Metals and Metallography **110**, 1 (2010).
2. Korolyov A.V., Kourov N.I., Nazarova S.Z., Dorofeev Yu.A., Volkova N.V., Belozarov E.V. Abstract: EASTMAG-2010, Ekaterinburg, Russia, p.75;

**РОЛЬ ПРИМЕСИ  
В ФОРМИРОВАНИИ ЗНАЧЕНИЯ ОСТАТОЧНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ  
РАЗБАВЛЕННЫХ СПЛАВОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ  
НА ОСНОВЕ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ**

*Гапонцев В.В.<sup>1</sup>, Циовкин Ю.Ю.<sup>2</sup>*

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

<sup>2</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: g\_v\_v@mail.ru

С помощью метода кинетического уравнения в рамках двухполосной модели проводимости Мотта [1] получено выражение для расчёта значений остаточного электросопротивления разбавленных сплавов переходных металлов на основе ферромагнетиков:

$$\rho_s = \frac{3\pi c}{e^2 \hbar n_s v_s^2} \cdot B^\uparrow B^\downarrow.$$

$$\frac{g_d^\uparrow(E_F)(\Delta D^\uparrow)^2 g_d^\downarrow(E_F)(\Delta D^\downarrow)^2}{g_d^\uparrow(E_F)(\Delta D^\uparrow)^2 g_s^\downarrow(E_F)|1 - B^\downarrow G_d^\downarrow \Delta D^\downarrow|^2 + g_d^\downarrow(E_F)(\Delta D^\downarrow)^2 g_s^\uparrow(E_F)|1 - B^\uparrow G_d^\uparrow \Delta D^\uparrow|^2},$$

где

$$B^{\uparrow(\downarrow)} = \frac{1}{q^{\uparrow(\downarrow)} \sqrt{4k_F^2 + q^{\uparrow(\downarrow)2}}} \cdot \left( \frac{e^2}{\varepsilon_0 \Omega_0} \right),$$

$c$  – концентрация примеси,  $n_s$  – число электронов в полосе проводимости,  $v_s$  – скорость электрона проводимости,  $g_j^\sigma(E_F)$  – плотность электронных состояний в полосе проводимости  $j$  с поляризацией спина  $\sigma$  на уровне Ферми,  $G_d^\sigma$  – диагональная часть функции Грина,  $q^\sigma$  – радиус экранирования,  $k_F$  – волновой вектор электрона проводимости,  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость среды,  $\Omega_0$  – объём элементарной ячейки растворителя,  $\Delta D^\sigma$  – относительный избыточный заряд.

Часть параметров, использованных в вычислениях, получена с применением первопринципного метода ТВ-LMTO-ASA [2].

Ранее было установлено, что роль примеси в формировании значения остаточного электросопротивления разбавленных сплавов немагнитных  $3d - 5d$ -металлов может быть описана единственным параметром – относительным избыточным зарядом [3]. В случае сплавов на основе ферромагнетиков относительный избыточный заряд  $\Delta D^\sigma$  есть аддитивная безразмерная величина, состоящая из трёх слагаемых, отвечающих за нескомпенсированный электрический заряд, деформацию решётки и магнитный вклад, появляющиеся в ячейке растворителя при замене одного из «родных» атомов примесным.

Показано, что в случае сплавов на основе никеля возможно использовать упрощённую модель, учитывающую только один канал рассеяния электронов проводимости – с поляризацией спина «вниз». Такое упрощение позволяет в рамках простых модельных предположений провести более детальный анализ полученных данных, чем в случае сплавов на основе железа, где необходимо учитывать оба канала рассеяния – со спином «вверх» и со спином «вниз».

1. Mott N.F., Adv. Phys., **13**, 325 (1964)

2. O.K. Anderson, Phys. Rev. B, **12**, 3060 (1975)

3. Yu. Yu. Tsiovkin, A. N. Voloshinskii, V. V. Gapontsev and V. V. Ustinov, LTP, **32**, 863 (2006)

## СЛАБО НЕКОГЕРЕНТНЫЙ ПРЕДЕЛ МЕЖСЛОЕВОЙ ПРОВОДИМОСТИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

*Григорьев П.Д.\**

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

\*E-mail: grigorev@itp.ac.ru

Теоретически исследована зависимость от магнитного поля проводимости в слоистых квазидвумерных металлах [1,2]. Проведено исследование угловой зависимости магнитосопротивления и магнитных квантовых осцилляций в квазидвумерных металлах в когерентном пределе, то есть когда имеется хорошо определённый трёхмерный закон дисперсии электронов. [1] Эти эффекты традиционно используются для определения закона дисперсии электронов в металле и геометрии поверхности Ферми. В последнее время этот эффект успешно конкурирует с ARPES (спектроскопией фотоэммитированных электронов с угловым разрешением) для получения данных об электронной структуре высокотемпературных сверхпроводников. Получены аналитические формулы для угловой зависимости магнитосопротивления и частоты магнитных квантовых осцилляций, удобные для извлечения параметров электронной дисперсии из экспериментальных данных, и проведено сопоставление с экспериментом. Исследована область применимости полученных и более ранних результатов. Показано, что используемые ранее для анализа экспериментальных данных теоретические результаты имеют ограниченную область применимости, и часто оказываются неверными. Проведены численные расчёты угловой зависимости магнитосопротивления для параметров, соответствующих слоистым высокотемпературным сверхпроводникам.

Исследован также «слабо некогерентный» межслоевой перенос электронов в магнитном поле. В сильно анизотропных слоистых проводниках, когда время свободного пробега электронов меньше времени их межслоевого туннелирования, стандартная трёхмерная теория проводимости в магнитном поле становится не применимой. Это происходит, поскольку такая электронная система близка к двумерной, и примеси намного сильнее на неё действуют. Однако, даже очень малый перескок электронов между слоями делокализует электронные состояния, выводит систему из состояния квантового эффекта Холла и приводит к металлической межслоевой проводимости. В работе предложена теория магнитных квантовых осцилляций проводимости и угловой зависимости магнитосопротивления в таком слабо некогерентном пределе [2]. Показано, что температура Дингла растёт пропорционально квадратному корню от величины магнитного поля, что необходимо учитывать при извлечении эффективной массы и времени рассеяния. Кроме того, это приводит к монотонному росту межслоевого магнитосопротивления в минимумах магнитных квантовых осцилляций или усреднённого по квантовым осцилляциям. Этот монотонный рост наблюдается во многих экспериментах по слоистым металлам и представляет загадку уже более 10 лет. Угловая зависимость магнитосопротивления в слабо некогерентном пределе также имеет ряд новых свойств. Например, изменяются угловые осцилляции магнитосопротивления.

Теория объясняет эксперименты в органических металлах, высокотемпературных сверхпроводящих слоистых соединениях, гетероструктурах и других слоистых соединениях.

1. P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B, **81**, 205122 (2010)
2. P.D. Grigoriev, arXiv:1010.0926, (2010)

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТЕКЛООБРАЗНОГО  
(GeSe)<sub>0.05</sub>(CuAsSe<sub>2</sub>)<sub>0.95</sub>

Куручка К.В.\*, Мельникова Н.В.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kirill.k@e1.ru

Материалы из системы Cu-Ge-As-Se проявляют интересные электрофизические свойства [1,2]. Цель работы — исследование электрических свойств стеклообразного соединения (GeSe)<sub>0.05</sub>(CuAsSe<sub>2</sub>)<sub>0.95</sub> в интервале частот переменного напряжения 500 Гц–200 кГц при температурах 10–300 К.

Для проведения исследований в интервале температур 10–300 К использовали автономный криостат замкнутого цикла с двухступенчатым криогенным рефрижератором DE-204SL, основанном на цикле Гиффорда-МакМагона, с использованием гелиевого водоохлаждаемого компрессора. Для предохранения исследуемого образца от окисления и уменьшения выхода летучих компонентов из объёма образцов осуществляли вакуумную откачку полости криостата до давления 10<sup>-3</sup> мм рт. ст. и, для улучшения теплообмена и повышения однородности температурного поля, заполняли рабочую зону гелием. Электрические свойства измеряли анализатором импеданса RCL-2000.

Аморфность синтезированного соединения подтверждена рентгенографической аттестацией, которая проведена с помощью дифрактометра Shimadzu XRD 6000 (монохроматическое излучение Cu-K<sub>α</sub>).

Температурные зависимости электрических свойств исследовали на частотах, характеризующих объёмные свойства образцов и исключающих влияние контактов [3]. При частоте переменного напряжения 8 кГц, при увеличении температуры от 10 до 180 К значения вещественной и мнимой частей импеданса, удельной электропроводности, тангенса угла потерь и диэлектрической проницаемости меняются незначительно. Существенные изменения в поведении электрических параметров наблюдались в области температур 215–230 К, и эти интервалы с увеличением частоты смещаются в сторону более высоких температур.

На температурной зависимости электропроводности, оцененной по вещественной части адмиттанса, чётко видны две области с различными значениями энергии активации. При повышении температуры, переход от низких значений энергии активации носителей к более высоким может быть обусловлен перебросами в зону проводимости электронов из локализованных состояний.

Проведена оценка температурного коэффициента сопротивления (ТКС) материала. Значения ТКС рассчитывались по формуле  $\alpha = \operatorname{tg} \gamma$ , где  $\gamma$  — угол наклона графика  $\ln R(T)$  к оси  $T$ . ТКС при всех частотах напряжения, подаваемого на образец, отрицателен, что характерно для полупроводниковых материалов [4].

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

1. Алимбарашвили Н.А., Касаткин Б.Е., Борисова З.У., Неорган. Материалы, **10**, 21,29 (1974)
2. Мельникова Н.В., Бабушкин А.Н., Савина О.В., Физика и техника высоких давлений, **19**, 1, 63, (2009)
3. Графов Б.М., Укше Е.А., Электрохимические цепи переменного тока, Наука, (1973)
4. Под. ред. Хейванга В., Аморфные и поликристаллические полупроводники, Мир, (1987)

ОСЦИЛЛЯЦИИ ШУБНИКОВА ДЕ ГАЗА В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ Гудина С.В.<sup>1</sup>, Клепикова А.С.<sup>2</sup>, Неверов В.Н.<sup>1</sup><sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: neverov@imp.uran.ru

Двумерном электронный газ имеет постоянную плотность состояний  $g_0 = \frac{\pi b^2}{m}$ , где  $m$  – эффективная масса носителей заряда. В магнитном поле (при  $T = 0$  и отсутствии рассеяния) образуется серия  $\delta$ -образных уровней Ландау (УЛ), которые размываются температурой и конечным временем жизни (рассеяние) в одноэлектронном состоянии. Число состояний одноэлектронных состояний в одном УЛ равно  $n_B = eB/h$ . Если УЛ симметрично размывы, то положение минимумов и максимумов осцилляций Шубникова - де Гааза определяется только концентрацией электронов в структуре  $B_\nu = B_1/\nu$ , где  $B_1 = nh/e$ , а  $\nu$  принимает целые значения.

Проведены измерения гальваномагнитных эффектов на гетероструктуре  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  в магнитных полях до 12 Т и температурах 2–4.2 К. В исследованном нами диапазоне магнитных полей УЛ двукратно вырождены.

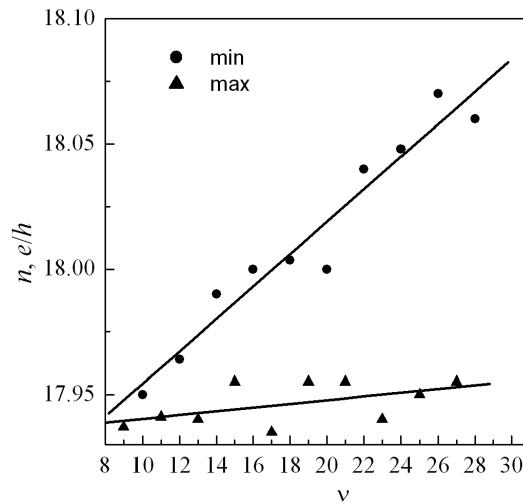


Рис. 1. Концентрация электронов от фактора заполнения уровня Ландау

На рисунке 1 приведена концентрация электронов, полученная из положения максимумов (нечетные факторы заполнения) и минимумов (четные факторы заполнения) осцилляций Шубникова – де Гааза. Концентрация электронов полученная из максимумов не зависит от фактора заполнения, а из минимумов наблюдается слабая зависимость (порядка 1%). Такое поведение положения осцилляций можно объяснить несимметричностью УЛ. Такой вид плотности состояний УЛ может объяснен или асимметричностью УЛ предложенный в [1] или различной шириной УЛ с противоположно направленными спинами [2].

1. S. Bonifacie, et al. Phys. Rev., **74**, 245303 (2006)2. A.M. Gilbertson, et al. Phys. Rev., **79**, 235333 (2009)



## О МЕХАНИЗМЕ ПРОВОДИМОСТИ В КОМПОЗИТЕ ПСКК/KDP

Неустроев А.С.\* , Семёнова М.И.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

\*E-mail: neustroevas@rambler.ru

В работе [1] представлены исследования протонной проводимости композитов ПСКК (полисурьмяная кристаллическая кислота) — KDP (дигидрофосфат калия) на в зависимости от массовых соотношений их компонентов и способа приготовления. Образцы приготавливались методом осаждения KDP на ПСКК или же прессованием механических смесей. При интерпретации полученных результатов авторы [1] используют модель проводимости композитов, предложенную в [2]. Однако эта модель не описывает резкий скачок проводимости для осажденного образца с массовой долей KDP 20% (рис.1). Этот образец обладает протонной проводимостью как минимум на полтора порядка превышающей проводимость других образцов и чистой ПСКК. В данном докладе обсуждается механизм протонной проводимости в композитах ПСКК/KDP.

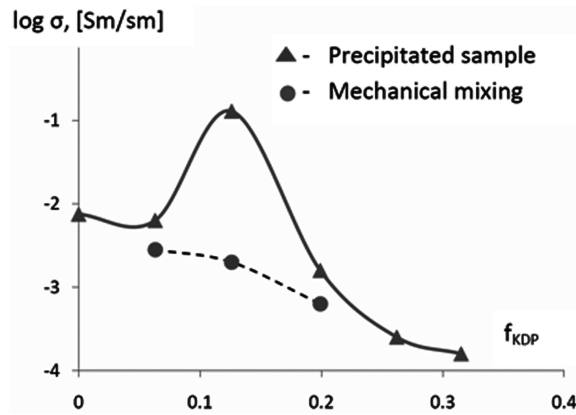


Рис. 1. Концентрационная зависимость проводимости композитов ПСКК/KDP при 350 К

На рентгенограммах осажденных образцов дифракционные максимумы KDP наблюдаются при массовой доле KDP большей 30%. Соответственно в образцах с меньшей массовой долей KDP, он находится в аморфном состоянии. Вероятно, это связано с тем, что при осаждении KDP покрывает поверхность кристаллов ПСКК. При этом возможно образование на границе двух фаз переходного слоя с высокой степенью разупорядоченности. Для образца с массовой долей KDP 20% толщина слоя KDP на поверхности кристаллов ПСКК составляет около 2 Å. Тогда толщина переходного слоя, называемого в литературе интерфейсом, составляет 4–5 Å. Именно в таких слоях возможно образование разупорядоченного и относительно устойчивого состояния (интерфейсной фазы), в которой может происходить быстрый ионный транспорт [3]. Кроме того, массовой доле KDP 20% соответствует объемная ~13%, что близко к порогу перколяции. При этом возможно образование интерфейсного кластера простирающегося на весь образец и обеспечивающего высокие значения его проводимости. При увеличении объемной доли KDP (толщины слоя) термодинамически выгодной становится кристаллизация KDP. Кристаллы KDP не являются проводниками и блокируют проводящие пути, что приводит к уменьшению проводимости композитов.

1. Zakharyevich D.A., Neustroev A.S., Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 1256E, 1256-N16-42 (2010)
2. Уваров Н.Ф., Композиционные твердые электролиты, СО РАН (2008)
3. Garcia-Barriocanal J. et al., Science, **321**, 676 (2008)

## НАНОКРИСТАЛЛИЗАЦИЯ В ТОНКИХ АМОРФНЫХ ПЛЁНКАХ Si-M (M=Cr, Mn)

*Новиков С.В.<sup>1\*</sup>, Бурков А.Т.<sup>1</sup>, Мельникова Н.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Лейбниц институт физики твёрдого тела и материаловедения, Дрезден, Германия

\*E-mail: s.novikov@mail.ioffe.ru

В данной работе исследуются процессы кристаллизации, электрическая проводимость и термоэдс тонких плёнок Cr-Si и Mn-Si в интервале температур 300 К–1000 К. Плёнки были получены магнетронным распылением и осаждением на холодную Si/SiO<sub>2</sub> подложку. Полученные таким образом плёнки имеют аморфную структуру. В процессе отжига, плёнки переходят из аморфного в нанокристаллическое состояние (НК). В ходе всего термического воздействия, выполнялись измерения их электронных транспортных свойств. В зависимости от начального состава, тонкие плёнки переходили в однофазное или многофазное НК состояние со средним размером зерна от 10 нм до 20 нм [1].

Существуют различные методы для получения НК материалов. Любой метод контролируемой кристаллизации из аморфного состояния имеет свои сложности и особенности, которые существенно сказываются на электронных транспортных свойствах полученных плёнок. Существенной проблемой в ходе создания НК материала является проблема получения чистой НК фазы. При кристаллизации из аморфного состояния, кристаллиты и их границы формируются в результате твердотельной реакции без взаимодействия с окружающей средой. Это позволяет устранить нежелательные факторы такие, как загрязнение из окружающей среды или искажение кристаллической решётки в ходе наносинтеза. Поэтому полученные этим методом плёнки, являются плотными и содержат нанокристаллиты с чистыми интерфейсами.

В процессе отжига плёнки проходят несколько стадий. В самом начале свойства плёнок определяются аморфным состоянием и имеют типичные для такого состояния температурные зависимости. На начальных стадиях кристаллизации, при низких температурах отжига происходит перераспределение атомов и изменение ближнего порядка, который можно наблюдать по температурным или временным зависимостям термоэдс и электропроводности. Формирование НК фазы в аморфной матрице начинается при  $T_{cr}$ .

Было установлено, что возрастающее количество НК зёрен, по мере отжига, приводит к возрастанию измеряемого сопротивления. Т.к. измеряемое сопротивление определяется эффективным сечением проводящей фазы, то можно предположить, что в ходе отжига это сечение уменьшается. Уменьшение сечения проводящей фазы связано с тем, что зёрна окружены низкопроводящими интерфейсами и поэтому, электрический ток проходит, главным образом, через аморфную матрицу. Это означает, что измеряемое сопротивление определяется эффективным сечением аморфной фазы. Возрастающее количество НК зёрен, по мере отжига, приводит к уменьшению эффективного сечения аморфной матрицы и, следовательно, к возрастанию измеряемого сопротивления.

Дальнейшее увеличение температуры или времени отжига приводит к образованию нанокристаллического перколяционного кластера и резкому уменьшению сопротивления.

1. A. T. Burkov, H. Vinzelberg, J. Schumann, T. Nakama, K. Yagasaki, J. Appl. Phys., **95**, 3229 (2001)

**СТРУКТУРА ПРОФИЛЯ ПОТЕНЦИАЛА И ХАРАКТЕР РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ТРАНЗИСТОРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С ДВУМЕРНЫМИ ТРАНСПОРТНЫМИ КАНАЛАМИ***Орлов М.Л.\* , Орлов Л.К.*

Институт физики микроструктур РАН, г. Нижний Новгород, Россия

\*E-mail: orlovml@ipm.sci-nnov.ru

Выходные характеристики современных полевых транзисторов, полученные на постоянном токе, обладают рядом особенностей, одна из которых проявляется в наблюдении на них в разных температурных режимах хорошо выраженного участка отрицательного дифференциального сопротивления (ОДС) при аномально низких напряжениях ( $\sim 0.1$  В) на стоке транзистора [1]. Аномально низкий порог формирования ОДС в короткоканальной транзисторной структуре возникает как при уменьшении эффективной длины затвора, так и при снижении плотности электронов в транспортном канале. Анализ выходных характеристик транзистора, выполненный с использованием двухтемпературной модели переноса заряда, демонстрирует в системе эффективный переброс горячих электронов между двумя транспортными каналами с разными характеристиками электронов. Проведённые расчёты показали, что наблюдаемые на выходных характеристиках исследуемых транзисторов закономерности объясняются резонансными туннельными переходами горячих электронов с уровней размерного квантования квантовой ямы, образующей транспортный канал, на состояния примесных центров, локализованных в области дельта-легирования верхнего барьерного слоя. Последующий пробой мелких примесных центров в сильном электрическом поле и искажение краёв зон в слоях гетеросистемы, вследствие наложения потенциала пространственно-разделённых свободных электронов и связанных зарядовых центров, обеспечивает формирование второго параллельного транспортного канала с более низкой, чем в основном двумерном транспортном канале, подвижностью электронов [2].

В настоящей работе в квазигидродинамическом приближении рассмотрено точное решение задачи о характере распределения потенциала, как внутри, так и вне транспортного канала. Решение системы дифференциальных уравнений, включающей уравнение Пуассона и уравнения непрерывности зарядов и токов, получено методом сеток с использованием схемы Гумбольда. Особое внимание уделено анализу туннельных характеристик барьера между транспортным каналом и верхним легированным барьерным слоем в транзисторных структурах, выполненных на базе различного типа гетерокомпозиций: Si/SiGe/Si, SiGe/Si/SiGe, SiC/SiGe/Si, InAlAs/InGaAs/InAlAs. Изучены зависимости ширины и формы потенциального барьера на гетерогранице от уровня легирования верхнего барьерного слоя, ширины транспортного канала, степени упругой релаксации слоёв, определяющей ширины зон полупроводников и энергии разрыва зон на гетерограницах, а также от характера и величины расплывания параметров контактирующих материалов в окрестности гетерограниц структуры. Проведено исследование формы потенциала внутри транспортного канала, оказывающей влияние на положение уровней размерного квантования в потенциальной яме. Детально проанализирован профиль распределения носителей заряда поперек транзисторной структуры, что представляется весьма важным для оценки роли паразитных токов, шунтирующих проводимость транспортных электронов по каналу транзистора.

*Работа выполнялась при поддержке РФФИ, номер проекта 08-02-97017р – «Поволжье».*

1. Орлов М.Л. Известия РАН. Серия физическая, **73**, 115 (2009)
2. Орлов М.Л., Орлов Л.К. Физика и техника полупроводников, **43**, 679 (2009)

МОДЕЛЬ ЭМЕРИ В  $DMFT+\Sigma_k$  ПОДХОДЕ

Павлов Н.С.\*, Некрасов И.А.

Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: pavlovns@gmail.com

Высоко температурные сверхпроводники на основе меди (ВТСП-купраты) давно и интенсивно исследуются, и не потеряли своей актуальности по сей день. В определённой области температур (выше температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$ ) и допирования ( $5\% \lesssim p \lesssim 20\%$ ) ВТСП-купраты находятся в так называемой псевдощелевой фазе. Изучение данной фазы можно проводить в рамках современного теоретического метода: теории динамического среднего поля [1] с  $k$ -зависящей собственно-энергетической частью ( $DMFT+\Sigma_k$ ) [2].

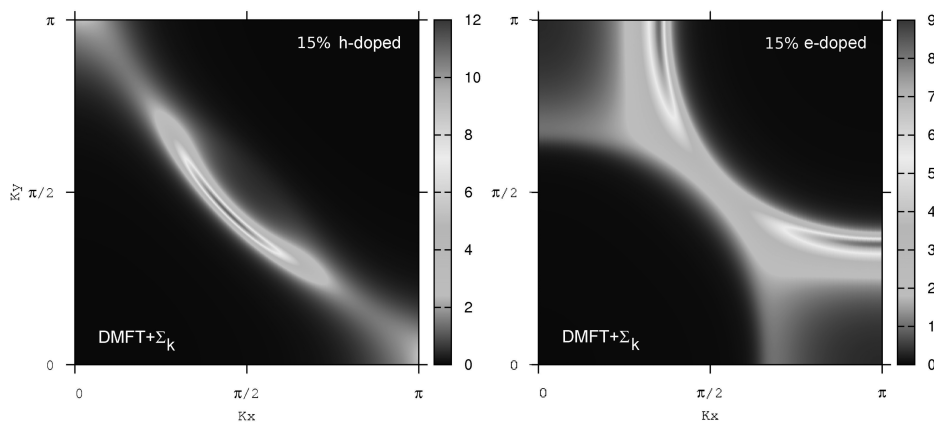


Рис. 1. Поверхности Ферми из  $DMFT+\Sigma_k$  расчёта модели Эмери: 15% дырочного (слева) и 15% электронного (справа) легирования

Известно, что на уровне Ферми в системах ВТСП-купратов лежит только одна зона. Поэтому многие теоретические работы рассматривают при описании свойств ВТСП-купратов эффективную однозонную модель, что связано с простотой и хорошим качественным согласием с наблюдаемыми экспериментами. Однако наряду с эффективной медной зоной так же важен учёт кислородных состояний  $CuO_2$  плоскости в случае дырочного легирования [3]. Поэтому дальнейшим шагом после эффективной однозонной модели является рассмотрение в рамках трехзонной модели (модель Эмери [3]), что и наблюдается в последние годы в мировой науке.

В рамках обобщённого  $DMFT+\Sigma_k$  подхода были выполнены расчёты электронных свойств ВТСП-купратов в приближении трёхзонной модели Эмери. Результатами проведённых расчётов являются плотности состояний, контурные карты спектральных функций и поверхностей Ферми (ПФ). На рисунке 1 приведены ПФ, на которых явно выражено псевдощелевое поведение (частичное разрушение ПФ и проявление теневой ПФ) и которые хорошо согласуются с экспериментальными ARPES поверхностями Ферми [4,5].

1. Georges A., Kotliar G., Krauth W. and Rozenberg M.J., Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996)
2. Sadovskii M.V., Nekrasov I.A., Kuchinskii E.Z., Prushke Th., Anisimov V.I., Phys. Rev. B **72**, 155105 (2005)
3. Emery V.J., Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987)
4. Armitage N.P. et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 257001 (2002)
5. Borisenko S.V. et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 4453 (2000)

## ЭФФЕКТ ХОЛЛА В ЭЛЕКТРОННОМ СВЕРХПРОВОДНИКЕ $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ С РАЗНОЙ СТЕПЕНЬЮ БЕСПОРЯДКА

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

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

<sup>2</sup>Московский государственный инженерно-физический институт, г. Москва, Россия

E-mail: den1221@yandex.ru

Появление сверхпроводимости в  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$  зависит от уровня легирования и от степени беспорядка (содержания кислорода). Исследования эффекта Холла в электронных сверхпроводниках [1, 2] дают противоречивые результаты: знак эффекта Холла может быть как положительным, так и отрицательным в зависимости от содержания кислорода в этих соединениях. Таким образом, целью работы было экспериментальное исследование зависимости коэффициента Холла от магнитного поля в электронном сверхпроводнике  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$  с разной степенью беспорядка.

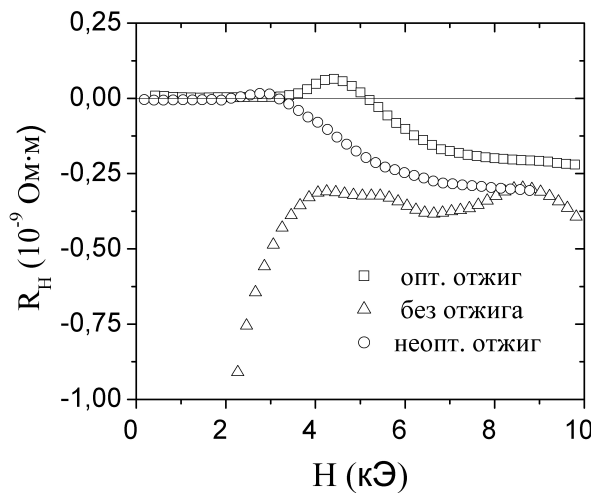


Рис. 1. Зависимость  $R_H(H)$  для сверхпроводника  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$  с разной степенью беспорядка при температуре 4.2 К

ходит незначительное изменение величины коэффициента Холла в нормальном, и сильное изменение удельного сопротивления, что говорит об увеличении степени беспорядка и локализации носителей на примесях.

Наблюдается anomальное поведение коэффициента Холла при изменении внешнего магнитного поля, которое проявляется в смене знака  $R_H$  с отрицательного на положительный.

*Работа выполнена по плану РАН (тема № 01.2.006 13394, шифр «Импульс»).*

- Higgins J.S., Dagan Y., Barr M.C. et al, Phys. Rev. B **73**, 104510 (2006)
- Jiang Wu, Peng J.L., Li Z.Y. et al, Phys. Rev. B **47**, 8151 (1993)

## СИММЕТРИЯ СПАРИВАНИЯ

В ЭЛЕКТРОННОМ СВЕРХПРОВОДНИКЕ  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ Петухова О.Е.<sup>1\*</sup>, Чарикова Т.Б.<sup>1</sup>, Шелушичина 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, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Московский государственный инженерно-физический институт, г. Москва, Россия

E-mail: olka-1987@yandex.ru

Эксперименты по определению симметрии параметра порядка в электронных сверхпроводниках дают противоречивые результаты [1,2,3]. Целью работы было экспериментально определить тип спаривания в электронном сверхпроводнике  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$  в зависимости от уровня легирования церием.

Были исследованы монокристаллические пленки  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$  с содержанием церия  $x = 0.15$  — оптимально легированная область,  $x = 0.18$  — перелегированная область и с разным содержанием нестехиометрического кислорода  $\delta$ .

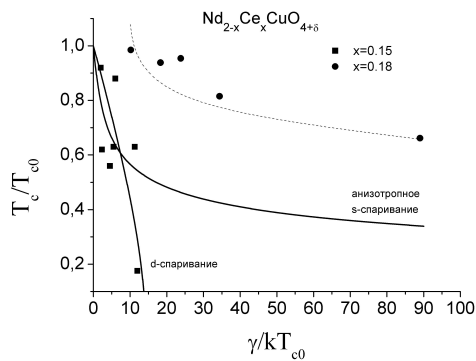


Рис. 1. Зависимости  $T_C/T_{C0}(\gamma/kT_{C0})$  для сверхпроводника  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$  с разным уровнем легирования церием. Сплошные линии — теоретические зависимости для случаев  $d$ -спаривания при анизотропном рассеянии на примесях и анизотропного  $s$ -спаривания. Штриховая линия приведена для удобства глаза

В работе были проведены измерения температурных зависимостей сопротивления для образцов  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$  в различных магнитных полях ( $B \parallel c, J \parallel ac$ ) в интервале температур 0.4–40 К. Получены зависимости нормированного наклона верхнего критического поля  $h = |dH_{c2}/dT|_{T_C} / |dH_{c2}/dT|_{T_{C0}}$  и критической температуры  $T_C/T_{C0}$  от степени беспорядка в системе  $\gamma/kT_{C0}$  (рис.1). В результате исследований показано, что данные зависимости существенно различаются для разных уровней легирования.

В области оптимального легирования ( $x = 0.15$ ) характер зависимостей  $h(\gamma/kT_{C0})$  и  $T_C/T_{C0}(\gamma/kT_{C0})$  коррелирует с теоретическим расчётам [4] для  $d$ -спаривания при наличии сильного анизотропного рассеяния на примесях.

В перелегированной области ( $x = 0.18$ ) наклон верхнего критического поля увеличивается с ростом параметра беспорядка, что характерно для сверхпроводников с анизотропным  $s$ -спариванием. Зависимость  $T_C/T_{C0}(\gamma/kT_{C0})$  также указывает на реализацию в электронном сверхпроводнике  $\text{Nd}_{1.82}\text{Ce}_{0.18}\text{CuO}_{4+\delta}$  симметрии спаривания, отличной от  $d$ -типа.

Работа выполнена по плану РАН (тема № 01.2.006 13394, шифр «Импульс»).

1. Kashiwaya S. et al., Phys.Rev.B, **57**, 8680 (1998)
2. Dagan Y. et al., Phys.Rev.Lett, **99**, 147004 (2007)
3. Armitage N.P. et al., Phys.Rev.Lett., **87**, 147003 (2001)
4. Посаженикова А.И., Садовский М.В., Письма в ЖЭТФ, **63**, 347 (1996)

**ВЛИЯНИЕ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ  
НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
НОВЫХ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ФАЗ  $\text{CaMCo}_2\text{V}_4\text{O}_{12}$**

*Устинова И.С.<sup>1\*</sup>, Мельникова Н.В.<sup>1</sup>, Кадырова Н.И.<sup>2</sup>, Зайнулин Ю.Г.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Уральский государственный университет, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ustinovairina@list.ru

Сложные фазы  $\text{AC}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$  активно изучаются в связи с обнаружением у некоторых из них эффекта колоссального магнитосопротивления ( $\text{CaCu}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$ ) и гигантской диэлектрической проницаемости ( $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ ) и в связи с тем, что при атомных замещениях в подрешётках разных металлов существенно меняются физические свойства соединений [1–3]. Цель настоящей работы — изучение влияния низких температур и высоких давлений на электрические свойства новых перовскитоподобных фаз  $\text{CaMCo}_2\text{V}_4\text{O}_{12}$  ( $M=\text{Co}, \text{Fe}$ ), полученных замещением части ионов меди в кубическом двойном перовските  $\text{CaCu}_2\text{V}_4\text{O}_{12}$  [4,5] на атомы кобальта или железа.

Высокотемпературный барический

синтез материалов осуществлен по описанной в [6] методике. Соединения кристаллизуются в кубической сингонии (пр. гр.  $\text{Im}\bar{3}$ ,  $Z = 2$ ) со структурой двойного перовскита. Температурные и барические исследования электрических свойств в области 10–300 К проводились на постоянном токе и переменном токе в области частот 0.2–200 кГц с помощью измерителя-анализатора импеданса RCL - 2000. Давления до 50 ГПа получены с помощью камеры высокого давления с алмазными наковальными типа «закругленный конус — плоскость».

В исследованных соединениях установлен металлический тип проводимости. Температурные зависимости электросопротивления

$\text{CaCoCu}_2\text{V}_4\text{O}_{12}$  представлены на рисунке. Наличие

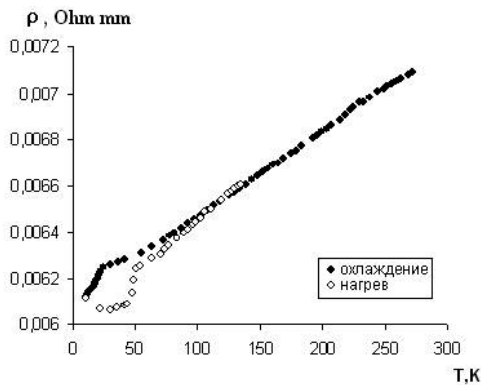


Рис. 1.

гистерезиса электросопротивления в окрестности 25 К согласуется с особенностями в поведении магнитной восприимчивости  $\chi$  (изменение выпуклости кривой  $\chi(T)$  и знака второй производной  $\partial^2\chi/\partial T^2$  в окрестности 25 К) и предварительными выводами о существовании в  $\text{CaCoCu}_2\text{V}_4\text{O}_{12}$  дальнего магнитного порядка при низких температурах [7]. Анализ влияния высоких давлений на электрические характеристики материалов позволил установить барические области существенных изменений в поведении комплексной электропроводности, комплексного сопротивления, тангенса угла потерь. Особенности в поведении электрических свойств могут быть связаны с обратимыми изменениями кристаллической и электронной структуры при изменении давления.

*Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы и гранта РФФИ 10-03-00163-а.*

1. Subramanian M.A., Li D., Duan N. et al., J. Solid State Chem., **151**, 323, (2000)
2. Muller J., Haouzi A., Lavrov C. et al., Mater. Res. Bull., **21**, 1131, (1986)
3. Zeng Z., Greenblatt M., Subramanian M.A. et al., Phys. Rev. Lett., **82**, 3164, (1999)
4. Кадырова Н.И., Тютюнник А.П., Зубков и др., ЖНХ, **48**, 1941, (2003)
5. Hiroshi Shikari, Takashi Saito, The Physical Society of Japan, **77**, 064705-1, (2008)
6. Кадырова Н.И., Мельникова Н.В., Устинова И.С. и др. Известия РАН. Серия физ., **73**, 1639, (2009)
7. Кадырова Н.И., Зайнулин Ю.Г., Захарова Г.С. и др. Труды Международного симпозиума ODPO-13 «Order, Disorder and Properties of Oxides», I, 167, (2010)





# **ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ**



**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МНОГОФАКТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА  
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНОГО СОСТАВА**

*Карзанова М.В.<sup>1\*</sup>, Калинина Ю.И.<sup>1</sup>, Чигиринский Ю.И.<sup>2</sup>*

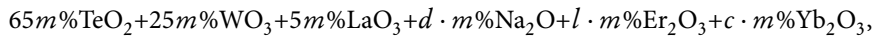
<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский физико-технический институт, г. Нижний Новгород, Россия

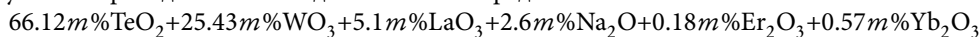
\*E-mail: cherrymary08@mail.ru

Вольфрам–теллуридные и фосфатные стёкла, легированные редкоземельными элементами, являются перспективными материалами для оптоэлектроники. Фосфатные стёкла превосходят вольфрам-теллуридные по своим люминесцентным свойствам, но обладают очень низкой химической стойкостью. В данной работе создано стекло на основе оксидов Te, W, La, Na, легированных Er и Yb, с люминесцентными свойствами, не уступающими свойствам фосфатных стёкол. Для этого были применены методы многофакторного эксперимента [1], которые позволяют исследовать влияние сразу нескольких факторов и с известной степенью точности получить численную зависимость характеристики состав-свойство.

Исследовались стекла состава:



где  $d, l, c$  — содержание  $Na_2O, Er_2O_3, Yb_2O_3$  в молярных процентах соответственно. В качестве исследуемых факторов рассматривались  $d, l$  и  $S$ , где  $S$  — отношение концентраций оксида Yb к оксиду Er. С помощью метода круглого восхождения [1] была получена линейная модель поверхности отклика в факторном пространстве по отношению к исследуемым параметрам. Сама функция отклика представляла собой  $Y = \ln\left(\frac{I\tau_0}{\tau_0 - \tau}\right)$ , где  $I$  — интенсивность люминесценции,  $\tau$  — время жизни,  $\tau_0$  — максимально возможное время жизни фотолюминесценции, при котором, не наблюдается перепоглощение в таких стёклах ( $\tau_0 = 6$  мс). Проведённые эксперименты позволили численно определить «почти стационарную область» [1] поверхности отклика. Для описания влияния выбранных факторов на люминесцентные свойства стёкол в данной области требовалось проведение полного факторного эксперимента с применением нелинейной модели поверхности отклика. Для этого был применён метод ортогонального планирования второго порядка [1]. В результате проведённых исследований был определён состав стекла:



с наилучшими люминесцентными характеристиками (интенсивность фотолюминесценции, время жизни фотолюминесценции). Полученное стекло по своим свойствам очень близко к фосфатным стёклам. Люминесцентные характеристики для фосфатного стекла:  $I = 7.4$  отн. ед.,  $\tau = 4.9$  мс; для полученного вольфрам-теллуридного:  $I = 5.1$  отн. ед.,  $\tau = 5.4$  мс. Таким образом, с помощью методов многофакторного эксперимента при неполном знании механизма влияния состава многокомпонентного теллуридного стекла на его люминесцентные характеристики, создано стекло максимально близкое по своим свойствам к фосфатным стёклам.

1. Налимов В.В., Чернова Н.А., Статистические методы планирования экстремальных экспериментов, Москва, «Наука» (1965)

**РАСЧЁТ ПАРАМЕТРОВ ГЕНЕРАЦИИ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ  
В НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ  
С ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРОЙ**

*Карпов Д.А.\* , Батулин И.С., Шур В.Я.*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: dmitry.karpov@labfer.usu.ru

Данная работа посвящена расчёту параметров генерации второй гармоники лазерного излучения в нелинейно оптических сегнетоэлектрических монокристаллах с доменной структурой. Актуальность данной работы связана с растущим применением доменной инженерии — созданием доменной структуры с заданными параметрами для управления свойствами кристаллов. В частности, кристаллы с регулярной полосовой доменной структурой широко используются для реализации высокоэффективного нелинейно-оптического преобразования длины волны лазерного излучения. Одним из частных случаев нелинейно-оптического преобразования является генерация второй гармоники (например, преобразование ближнего инфракрасного лазерного излучения в излучение в сине-зелёном диапазоне оптического спектра).

В расчётах использовалось приближение поля монохроматической плоской волны [1] без предположений постоянства амплитуды первой гармоники. Все расчёты проводились численно с использованием MathCAD и Visual C++, дифференциальные уравнения второго порядка решались методом Эйлера [2]. Все расчёты проводились для монокристаллов ниобата лития ( $\text{LiNbO}_3$ ), легированного 5% MgO с периодической доменной структурой, рассчитанной для генерации второй гармоники излучения твердотельного Nd:YAG лазера с длиной волны 1064 нм.

Расчёт распространения волн первой и второй гармоники в кристалле проводился с учётом доменной структуры при произвольном расположении доменных стенок.

Проведены расчёты генерации второй гармоники в монокристаллах ниобата лития с учётом отклонения длины волны от расчётной и определены предельные величины отклонений в зависимости от длины кристалла.

Исследована зависимость интенсивности поля второй гармоники от скважности доменной структуры (отношения ширины доменов одного знака к периоду). Показано, что оптимальным для преобразования в первом порядке квазифазового синхронизма оптимальным является значение скважности 0.5. Вид зависимости эффективности преобразования от скважности практически не зависит от плотности мощности излучения накачки.

*Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты 08-02-12173-офи, 08-02-99082-р-офи); РФФИ-НЦНИ (грант 05-02-19648); Программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России 2009-2013» Федерального агентства по образованию (контракты П870 и П2127); и Федерального агентства по науке и инновациям (контракты 02.74011.0171 и 02.552.11.7069).*

1. Boyd R.W., Nonlinear Optics, Academic Press (2007)
2. Лапчик М.П., Рагулина М.И., Хеннер Е.К., Численные методы, Academia (2004)

**AB-INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ФТОРИДА КАЛЬЦИЯ**

*Козин Р.В.\**, Слепухин Г.С., Никифоров А.Е., Чернышев В.А.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kozin@pm.convex.ru

Интерес к флюориту, который является широкозонным диэлектриком, обусловлен разнообразными возможностями его применения, в частности в виде эпитаксиальных пленок  $\text{CaF}_2/\text{Si}$ , применение которых обусловлено взаимным расположением запрещенных зон  $\text{CaF}_2$  и Si. При выращивании на подложке симметрия  $\text{CaF}_2$  понижается до ромбоэдрической [1], поэтому представляет интерес расчёт зонной структуры фторида кальция в кубической и ромбоэдрической фазах.

Рассчитана зонная структура, электронная плотность, значения коэффициентов упругости, частоты колебаний в  $\Gamma$ -точке для фторида кальция в кубической и ромбоэдрической фазах, определены параметры релаксации при внедрении одиночного примесного иона  $\text{Yb}^{3+}$  в кристалл флюорита, построены карты зарядовых плотностей для дефектной и бездефектной ячеек.

Проведено сравнение частот фононных колебаний в  $\Gamma$ -точке, рассчитанных в оболочечной модели и из первых принципов.

Расчёты проводились в рамках метода линейных комбинаций атомных орбиталей, основанного на приближении Хартри-Фока. Моделирование дефекта проводилось в рамках модели суперячейки.

1. A. Tempel, A. Ramírez, A. Zehe, *Superficies y Vacío*, **9**, 166, (1999)

## ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОПТИЧЕСКИХ ПРИБОРОВ НА ОСНОВЕ СТРУКТУРИРОВАННЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

*Кондратьев Д.В.\**, *Мигранов Н.Г.*

Башкирский государственный педагогический университет, г. Уфа, Россия

\*E-mail: denisxxx@mail.ru

В работе рассматривается с точки зрения физики целый комплекс технологических приёмов, позволяющих создать уникальные системы отображения информации на основе микроструктурированных подложек, ограничивающих жидкокристаллическую мезофазу. Микроструктурное выравнивание обеспечивает уникальный уровень контроля ориентации длинных осей жидких кристаллов (ЖК) как вблизи поверхности выравнивания, так и во всем объеме образца ЖК.

Уже появившиеся устройства, использующие этот принцип выравнивания, содержат ячейки с произвольным углом наклона длинных осей молекул ЖК к поверхности выравнивания, градиентнооптические микролинзы и бистабильный ЖК режим [1].

Существует среди методов производства дисплеев, способ, использующий структурированные подложки, и здесь, авторами был вначале предложен теоретический подход, основанный на влиянии таких поверхностей на образец ЖК бесконечной толщины [2]. Далее, удалось рассмотреть модель влияния полосчатых структур на поведение системы в ограниченной ячейке. В исследованиях учитывались полосчатые структуры двух видов; получено аналитическое выражение, описывающее поле директора в отсутствие внешних полей. При этом картина распределения ориентации директора существенно меняется для тонких пленок ЖК, помещённых между двумя параллельными поверхностями [3].

Еще один современный метод, предлагающий создавать цветные изображения в ЖК средах, основан на распространении твистовых возмущений. Авторам также удалось предложить для этого случая физическую модель движения возмущения в толще ячейки, учитывающую начальное гауссовское угловое распределение директора. Результатом численных экспериментов в рассматриваемой модели явились установление времён релаксации, затухания и скорости движения твистовых волн.

В предлагаемой модели при наличии постоянного электрического поля под воздействием импульса лазера, вносящего искажение вблизи верхней подложки, а также при вращении верхней подложки по заданным законам. Динамика верхней пластины создает в объёме образца вращательный момент, на который оказывает влияние постоянное внешнее электрическое поле. Были рассмотрены несколько случаев динамического поведения верхней подложки: равномерное вращение, равноускоренное вращение.

Авторы исследовали теоретические модели поведения жидких кристаллов при различных граничных, структурированных условиях, при внезапном включении и выключении внешних электрических полей. Меняющиеся времена релаксации, появление недиссипативных соизмеримых структур и существенное влияние коэффициента  $K_{24}$  вместе с флексоэффектом явились теми существенными результатами этой части работы, направленными на создание приборов нового поколения на основе жидких кристаллов.

1. Smith N., Gass P., Tillin M., Raptis C., Burbridge D., Sharp Technical Journal, **92**, 5 (2005)
2. Кондратьев Д.В., Мигранов Н.Г., Вестник Поморского университета, **3**, 91 (2009)
3. Кондратьев Д.В., Мигранов Н.Г., Вестник Челябинского государственного университета, **12**, 41 (2010)

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ  
ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$   
МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ**

*Кортаев Е.В.<sup>1\*</sup>, Федоренко А.Д.<sup>1</sup>, Лаврухина С.А.<sup>2</sup>, Семушкина Г.И.<sup>1</sup>, Михеев А.В.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Новосибирский государственный технический университет, г. Новосибирск, Россия

\*E-mail: Jodow@rambler.ru

Слоистые дисульфиды хрома-меди интересны возможностью создания твёрдых растворов замещения на их основе. Свойствами этих растворов можно управлять, изменяя концентрацию внедряемых атомов. В частности, в настоящее время, изучаются свойства данных растворов на основе исходного дисульфида хрома-меди  $\text{CuCrS}_2$ , в котором атомы хрома замещаются ванадием.

В работе [1] было показано, что с увеличением концентрации ванадия в  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$  происходит переход металл-диэлектрик. Этот переход сопровождается появлением колоссального магнетосопротивления и увеличением ионной проводимости [1,2]. Авторами была отмечена значимость изменения зарядовых состояний атомов данных твёрдых растворов. Данные изменения были исследованы в работе [3] с помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Положения фотоэлектронных линий остовных атомных уровней, в первом приближении, можно сопоставить с зарядом на данных атомах. Однако, глубина выхода фотоэлектронов не превышает 10 нм, что не позволяет достоверно судить об изменении зарядового состояния данных веществ в «объёме» вещества.

В этой связи были проведены исследования соответствующих фотоэлектронных линий образцов, подвергнутых ионному травлению атомами аргона. Параллельно изучались рентгеновские эмиссионные линии атомов, поскольку глубина выхода рентгеновских фотонов составляет микроны. Это позволяет пренебрегать влиянием поверхностного слоя вещества и считать полученные данные соответствующими «объёму».

Изучались  $2p_{3/2}$  — фотоэлектронные линии меди, хрома, ванадия, серы. Были получены  $K_\alpha$ -линии (переход  $2p \rightarrow 1s$ ) атомов, входящих в состав растворов, а также валентные  $K_\beta$  — линии серы ( $3p \rightarrow 1s$ ) и  $L_\alpha$ -линии меди ( $3d \rightarrow 2p$ ). Валентные линии были построены в единой энергетической шкале, что позволяет предварительно изучить изменения электронного строения при изменении концентрации ванадия.

Помимо того, были проведены исследования как порошковых, так и керамических и монокристаллических образцов.

1. Абрамова Г.М., Петраковский Г.А., Физика низких температур, **32**, 954-967 (2006)
2. Альмухаметов Р.Ф., Якшибаев Р.А., Габитов Э.В., Физика твёрдого тела, **41**, 1450-1451, (1999)
3. Мазалов Л.Н., Соколов В.В., Крючкова Н.А., Вовк Е.И., Филатова И.Ю., Абрамова Г.М., Журнал структурной химии, **50**, 461- 467 (2009)

## ОПИСАНИЕ ИСКАЖЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ $\text{BaBiO}_3$ В РАМКАХ МЕТОДА LDA+U В БАЗИСЕ ФУНКЦИЙ ВАНЬЕ

*Коротин Д.М.*<sup>1\*</sup>, *Куколев В.И.*<sup>2</sup>, *Анисимов В.И.*<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Уральский Государственный Университет им. А. М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: dmitry@korotin.name

В работе приведены расчёты искажений кристаллической решётки соединения  $\text{BaBiO}_3$ , которое является базовым для высокотемпературного сверхпроводника  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$ . Согласно экспериментальным данным в чистом  $\text{BaBiO}_3$  наблюдаются искажения решётки, которые могут быть описаны как одновременное сжатие/растяжение («breathing») и поворот вокруг оси [110] («tilting») октаэдров  $\text{BiO}_6$  относительно их положения в структуре идеального кубического перовскита. Зонная структура  $\text{BaBiO}_3$  является диэлектрической.

Существующие расчёты электронной и кристаллической структур  $\text{BaBiO}_3$  в рамках приближения локальной электронной плотности либо вовсе не воспроизводят запрещённую щель, либо сильно недооценивают её величину. Искажения кристаллической решётки в существующих расчётах также сильно недооценены по сравнению с экспериментальными данными.

Особенностью электронной структуры данного соединения является сильная гибридизация между  $s$ -состояниями  $\text{Bi}$  и  $p$ -состояниями ближайших атомов  $\text{O}$ . Такие гибридизованные состояния формируют две частично заполненные энергетические зоны вблизи уровня Ферми. Бикомпонентный характер состояний не позволяет использовать метод LDA+U в традиционном виде, так как он был разработан для описания кулоновских корреляций между чистыми  $d$ -орбиталями.

В данной главе показано, что причиной наблюдаемых искажений кристаллической решётки являются кулоновские корреляции между состояниями вблизи уровня Ферми. Было предложено учитывать эти корреляции в рамках метода LDA+U, а в качестве коррелированных орбиталей использовать функции Ванье, центрированные на атомах  $\text{Bi}$  [1].

Применение указанного подхода позволило впервые описать не только электронную, но и кристаллическую структуры  $\text{BaBiO}_3$  в прекрасном согласии с экспериментальными данными. Экспериментально наблюдаемые искажения:  $b = 0,085 \text{ \AA}$ ;  $t = 10,3^\circ$ , искажения, полученные в приближении LDA+U:  $b = 0,075 \text{ \AA}$ ;  $t = 12^\circ$ .

Метод LDA+U в базисе функций Ванье может эффективно использоваться для описания электронной и кристаллической структуры сильнокоррелированных соединений в том случае, когда учёт динамических корреляций не обязателен.

1. Korotin Dm., Kozhevnikov A. V., Skornyakov S. L., Leonov I., Binggeli N., Anisimov V. I. and Trimarchi G., The European Physical Journal B, **65**, 91 (2008)



**ФОРМИРОВАНИЕ САМООРГАНИЗОВАННЫХ НАНОДОМЕННЫХ СТРУКТУР  
В РЕЗУЛЬТАТЕ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ  
В МОНОКРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ**

*Мингалиев Е.А.\**, Шур В.Я., Кузнецов Д.К., Лобов А.И., Негашев С.А., Румянцев Е.Л.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: eugene.mingaliev@labfer.usu.ru

Экспериментально исследовалось переключение поляризации в монокристаллах сегнетоэлектрического ниобата лития (НЛ) без приложения электрического поля в результате облучения поверхности импульсным лазерным излучением высокой мощности.

Облучение полярных поверхностей монокристаллов НЛ импульсным лазерным излучением: ультрафиолетовым (УФ,  $\lambda = 266$  нм) и инфракрасным (ИК,  $\lambda = 10.6$  мкм), приводит к появлению самоорганизованных нанодоменных структур [1]. Проведены исследования полученных структур после селективного химического травления методами оптической микроскопии и атомно-силовой микроскопии. С помощью высокоскоростной видеокамеры (300 кадр./с.) произведена in-situ визуализация процесса формирования нанодоменной структуры после ИК лазерного облучения.

Ранее было показано, что переключение поляризации в результате лазерного облучения происходит под действием пироэлектрического поля возникающего в процессе остывания образца после окончания лазерного импульса [1]. Было показано, что нанодоменные структуры состоят из изолированных нанодоменов и нанодоменных цепей. Цепи представляют собой одномерные упорядоченные ряды изолированных нанодоменов со средним размером до 30 нм [2]. Рост изолированных доменов в цепи приводит к их слиянию и формированию непрерывных доменных лучей со средней шириной до 300 нм.

In-situ визуализация с высоким временным разрешением показала, что формирование таких структур начинается с образования изолированных доменов с последующим ростом доменных лучей в трёх выделенных направлениях. Доменный луч растёт вдоль одного из выделенных направлений до тех пор, пока не встретит луч, растущий в другом выделенном направлении, в этом случае происходит «отражение» луча на «расстоянии взаимодействия», сопровождаемое сменой направления его роста.

Необходимо отметить, что наблюдаемый эффект может быть использован для создания самоорганизованных нанодоменных структур в монокристаллах НЛ для нелинейно-оптических применений.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 08-02-12173-офи, 08-02-99082-р\_офи, 08-02-90434-Укр-а, 10-02-96042-р-Урал-а, 10-02-00627-а), RFBR-CNRS (grant 05-02-19648), U.S. CRDF BRHE & FAE (PhD Award RNP 2.2.2.3.16019/Y5-P-05-10); Федерального Агентства по Образованию (контракт П870), Федерального Агентства по Науке и Инновациям (контракты 02.74011.0171 и 02.552.11.7069), Министерства Образования и Науки Российской Федерации (контракт П1262).*

1. Kuznetsov D.K., Shur V.Ya., Negashev S.A., Lobov A.I., Pelegov D.V., Shishkin E.I., Zelenovskiy P.S., Platonov V.V., Ivanov M.G., and Osipov V.V., *Ferroelectrics*, **373**, 133, (2008)
2. Shur V.Ya., Kuznetsov D.K., Lobov A.I., Nikolaeva E.V., Dolbilov M.A., Orlov A.N. and Osipov V.V., *Ferroelectrics*, **341**, 85, (2006)

## НОВЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИОННОГО ПРОФИЛЯ ЭЛЕМЕНТОВ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ В УСЛОВИЯХ АНОМАЛЬНОГО РАССЕЙЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

*Саламатов Ю.А.\**, *Бабанов Ю.А.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: salamatov@imp.uran.ru

Рефлектометрия (малоугловое рассеяние рентгеновских лучей) показала себя чувствительным структурным методом, весьма полезным при исследовании многослойных металлических наногетероструктур. Лучи, отражённые от различных интерфейсов плёнки, формируют интерференционную картину, анализ которой по методу Паррата [1] позволяет восстановить функцию распределения электронной плотности по глубине.

В данной работе предложен метод, при помощи которого из рефлектометрических данных можно получить концентрационные профили элементов, входящих в состав исследуемого образца. За основу взято интегральное уравнение, полученное в рамках первого борновского приближения (кинематического приближения) и описывающее связь коэффициента отражения (КО) с распределением электронной плотности [2]. Показано, что оно может быть преобразовано в уравнение, связывающее КО с концентрационными профилями элементов. Селективность по элементам достигается использованием аномальных условий рентгеновского рассеяния (вблизи К-края поглощения одного из элементов).

Проводилось сравнение рефлектометрических кривых, полученных при помощи этого уравнения с кривыми, рассчитанными по алгоритму Паррата (динамическая теория). Показано, что при использовании коррекции на критический вектор [2] можно добиться хорошего совпадения результатов даже в области достаточно малых векторов рассеяния.

Предложенное уравнение является комплексным, поэтому обратная задача может решаться как отдельно для действительной или мнимой его части, так и для обеих частей в системе. На модельных численных расчётах были апробированы все способы, решение системы уравнений показало наилучшие результаты. Обратная задача для данного уравнения является плохо обусловленной и при её решении используется метод регуляризации по Тихонову [3].

В реальном эксперименте по рефлектометрии фиксируется интенсивность отражённых лучей, пропорциональная квадрату модуля КО. Поэтому возникает задача восстановления действительной и мнимой части КО по известному квадрату модуля. Эта задача может быть решена с использованием логарифмического дисперсионного соотношения, предложенного М. В. Клибановым [4], хотя и не в общем случае.

Эффективность метода показана на модельных численных расчётах для многослойных систем Fe-Cr. Предлагаемый метод может быть полезен при исследовании концентрационного распределения элементов в тонких плёнках, а также в приповерхностных слоях массивных образцов.

*Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 08-02-99083 р-офи) и Президиума РАН (проект № 09-П-2-1032).*

1. Parratt L.G., Phys. Rev. **95**, 359 (1954)
2. Zimmerman K.M., Advanced analysis techniques for x-ray reflectivities: theory and application. Диссертация на соискание учёной степени доктора наук. Университет Дортмунда, Карлсруэ (2005)
3. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я., Методы решения некорректных задач. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. Изд. 2-е. (1979)
4. Klibanov M.V., Sacks P.E., J. Math. Phys., **33** (11), 3813 (1992)

РЕТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ И РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЕ ИЗУЧЕНИЕ  
ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ  
КОМПЛЕКСОВ ФТАЛОЦИАНИНОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Семушкина Г.И.<sup>1</sup>, Пляшкевич В.А., Гуляев Р.В.

<sup>1</sup>Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, г. Новосибирск, Россия

\*E-mail: spectroscopy@mail.ru

В последние десятилетия фталоцианины металлов и их производные являются интенсивно изучаемым классом координационных соединений [1,2]. Системы на основе таких соединений в настоящее время имеют широкий спектр применения благодаря наличию специфических свойств: химической инертностью и термической стабильностью, что объясняется сильным сопряжением  $\pi$ -электронной системы лигандов и металла.

Однако на свойства этих соединений значительно влияет модификация строения молекул, т.е. изменение центрального атома и периферических заместителей [3]. Для выявления влияния функциональных заместителей и центрального атома на структуру и свойства фталоцианинов в данной работе методами модельных квантово-химических расчётов, рентгеноэлектронной и эмиссионной спектроскопии было детально изучено электронное строение МРСr, где М – Cu, Co, Ni, Zn а R – F и H.

В настоящей работе получены C(1s), N(1s), M(2p), M(3s) – рентгеноэлектронные спектры и  $L_{\alpha}$  эмиссионные спектры изучаемых соединений. Следует отметить, что характер распределения и энергия внутренней рентгеновской эмиссионной  $L_{\alpha_{12}}$  – линии, отвечающей переходам электрона между остоновым и валентным уровнями атома ( $3d \rightarrow 2p$ ), несёт информацию об участии валентных  $3d$ -электронов исследуемых металлов в химической связи. Для получения более детальной информации об энергетическом положении внутренних уровней фторзамещённых и незамещённых фталоцианинов меди, также были получены  $K_{\alpha}$  эмиссионные спектры Cu ( $2p \rightarrow 1s$ ).

Методом DFT проведены квантово-химические расчёты, иллюстрирующие состав и энергетическое положение верхних занятых молекулярных орбиталей. На основании этих данных построены соответствующие модельные спектры. Полученная информация позволила изучить взаимодействие между центральным атомом металла и атомами лигандов и более детально интерпретировать рентгеновские эмиссионные спектры.

Установлено, что введение электроноакцепторных заместителей в бензольные кольца оказывает наибольшее влияние на атомы бензольного кольца, и не значительное на атомы азота, входящие во внутреннее гетероциклическое кольцо. Детальная интерпретация полученных экспериментальных данных также показала наличие химической связи центрального атома металла с периферийными заместителями.

1. Симон Ж., Андре Ж.-Ж. Молекулярные полупроводники, М. (1988)
2. Пахомов Л.Г., Леонов Е.С. Пленочные структуры на основе органических полупроводников, Ниж-Нов, (2007)
3. Ладик Я. Квантовая биохимия для химиков и биологов, (1975)

## ПАРАМЕТРЫ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В $\beta$ -ОБЛУЧЁННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ AlN

*Спиридонов Д.М.\*, Белоусова Е.Ю., Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А.*

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

\*E-mail: spirit-87@mail.ru

В настоящее время кристаллические подложки и керамические матрицы на основе нитрида алюминия находят широкое применение в микро- и оптоэлектронике. Известна также высокая чувствительность керамики AlN, стабилизированной оксидом иттрия, к ионизирующим излучениям корпускулярной и фотонной природы. В недавних работах была показана перспективность различных — наноразмерных и объёмных — модификаций указанного материала для дозиметрических применений с использованием методов термостимулированной (ТЛ) и оптически-стимулированной (ОСЛ) люминесценции. В этой связи изучение процессов стимулированного свечения и характера запасаения полученной дозы в нитриде алюминия представляет интерес и с точки зрения анализа фундаментальных свойств материала, и с позиций оптимизации его функциональных характеристик. Цель настоящей работы состояла в исследовании ТЛ процессов в монокристаллических образцах AlN, подвергнутых  $\beta$ -облучению.

Монокристаллические образцы были получены из мелкодисперсного порошка нитрида алюминия методом сублимации-реконденсации при определённых условиях и предоставлены для исследований ООО «Нитридные кристаллы». Диаметр образцов — 15 мм, толщина — 0.4 мм, качество обработки поверхности — еpi-ready. Регистрация люминесценции проводилась в диапазоне длин волн 300–600 нм. Для возбуждения ТЛ монокристаллы облучались при комнатной температуре  $\beta$ -излучением двух  $^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$ -источников с мощностями 43 мкГр/мин и 32 мГр/мин в месте расположения образца. Дозу варьировали временем облучения в диапазоне  $10^{-5}$  — 10 Гр. Регистрация ТЛ-сигнала проводилась в ходе линейного нагрева образца от комнатной температуры до 670 К со скоростью  $r = 2$  К/с.

Обнаружено, что наблюдаемый бесструктурный пик свечения для полученных зависимостей имеет температуру максимума  $T_{\text{max}} = 510$  К и полуширину  $\omega_T = 90$ –120 К. Указанные параметры растут с увеличением дозы до 4 Гр.

Проведен анализ экспериментальных данных с использованием формализма описания кинетических процессов общего порядка:

$$I(T) = s'' \cdot n_0 \cdot e^{-\frac{E}{kT}} \cdot \left( 1 + \frac{s'' \cdot (b-1)}{r} \cdot \int_{T_0}^T e^{-\frac{E}{kT'}} \cdot dT' \right)^{-\frac{b}{b-1}}, \quad (1)$$

где  $s''$  — «эффективный» частотный фактор,  $\text{с}^{-1}$ ;  $n_0$  — концентрация электронов на ловушках в начальный момент времени,  $\text{см}^{-3}$ ;  $E$  — энергия активации, эВ;  $k$  — постоянная Больцмана, эВ/К;  $T$  — температура образца, К;  $b$  — порядок кинетики;  $T_0$  — начальная температура.

Показано, что кривые ТЛ могут быть представлены в виде суперпозиции двух элементарных пиков, для которых выполнены оценки параметров формы. Рассчитаны значения кинетических характеристик для низко- и высокотемпературных компонент разложения:  $E = 0.56$  и  $1.02$  эВ и  $s'' = 1.00 \times 10^5$  и  $6.12 \times 10^9 \text{ с}^{-1}$ , соответственно. На основании анализа зависимости AlN от дозы  $\beta$ -облучения установлено, что в диапазоне  $10^{-5}$ –10 Гр она имеет линейный характер.

С учётом проведенной количественной оценки параметров ТЛ обоснован вывод о природе наблюдаемых люминесцирующих комплексов, которые активно высвечиваются при нагревании и связаны с примесными кислородсодержащими центрами вакансионного типа  $V_{\text{Al}}\text{-O}_N\text{-3N}$  и  $V_{\text{Al}}\text{-2O}_N\text{-2N}$ .

## СОЛЬВАТАЦИЯ АНИОНА В ДИПОЛЯРНОМ АПРОТОННОМ РАСТВОРИТЕЛЕ

Эркабаев А.М.<sup>1\*</sup>, Бушкова О.В.<sup>1</sup>, Попов С.Э.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Eaerkabaev@mail.ru

Сольватация аниона молекулами растворителя изучена в меньшей степени, нежели сольватация катиона. Считается, что одноатомные анионы, такие как  $\text{Br}^-$  и  $\text{I}^-$ , образуют устойчивые комплексы с молекулами растворителя, тогда как большие многоатомные анионы  $\text{ClO}_4^-$  и  $\text{AsF}_6^-$  вообще не сольватируются растворителем. Однако существуют экспериментальные данные, свидетельствующие о возможности сольватации многоатомных анионов растворителем. Поэтому была проверена возможность существования сольватных комплексов  $\text{ClO}_4^-(\text{CH}_3\text{CN})_n$  в газовой фазе с использованием квантовохимических расчётов.

Возможность образования комплекса проверялась по следующим критериям:

- устойчивость электронной структуры сольвата при фиксированном положении ядер фиксированной группе симметрии;
- устойчивость относительно смещений ядер в рамках фиксированной группы симметрии
- устойчивость относительно малых смещений ядер, не ограниченных группой симметрии.

Расчёт энергии комплекса проводился методом Рутана-Хартри-Фока с использованием комплекса программ GAMESS.

Также в данной работе ставились следующие задачи:

- оценка точности расчёта параметров комплекса;
- расчёт колебательного спектра устойчивых комплексов;
- выделение структурных и спектральных особенностей, позволяющих однозначно идентифицировать сольватный комплекс;
- анализ подвижности составных частей комплекса путём анализа проектированной плотности колебательных состояний.

Как показали квантовохимические расчёты, анион  $\text{ClO}_4^-$  способен взаимодействовать с молекулами диполярного апротонного растворителя ацетонитрила с образованием сольватных комплексов  $\text{ClO}_4^-(\text{CH}_3\text{CN})_n$ ,  $n = 1-4$ . Для всех комплексов были рассчитаны равновесные структуры и колебательные спектры. Для каждого устойчивого сольватного комплекса были выделены спектральные характеристики в области колебаний аниона  $\text{ClO}_4^-$  и в области колебаний  $\text{C}-\text{N}$  связи ацетонитрила. Анализ проектированной плотности колебательных состояний дал следующие результаты: анион  $\text{ClO}_4^-$  наиболее подвижен в комплексе  $n = 4$ , а наименее в комплексе  $n = 3$ ; подвижность сольватной оболочки возрастает с числом сольватации для  $n = 1-3$ , но уменьшается при  $n = 4$ .

*Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований ОХНМ РАН «Создание новых металлических, керамических, стекло-, полимерных и композиционных материалов», Целевой программы поддержки междисциплинарных проектов, выполняемых УрО РАН в содружестве с учёными СО РАН и ДВО РАН, а также Президента Российской Федерации (грант № МК-4799.2010.3).*



# **РЕЗОНАНСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ**





МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ  $RTiO_3$ *Агзамова П.А.<sup>1,2\*</sup>, Никифоров А.Е.<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: polina.agzamova@usu.ru

Взаимодействие между спиновой и орбитальной степенями свободы является важным объектом в физике сильнокоррелированных систем. В настоящее время обсуждается вопрос об орбитальном упорядочении в оксидах переходных металлов с сильными электронными корреляциями. С этой точки зрения, удобным модельным объектом являются титанаты лантана и иттрия (с общей формулой  $RTiO_3$ , где  $R = La, Y$ ).

Соединения  $RTiO_3$  обладают структурой орторомбически искажённого перовскита (пространственная группа симметрии  $Rnma$ ), в которой ион  $Ti^{3+}$  находится в  $3d^1$ -конфигурации. Искажения  $GdFeO_3$ -типа, наблюдаемые в таких кристаллах, определяют магнитную структуру и свойства этих соединений через основное орбитальное состояние.

Существует две схемы описания орбитальных и магнитных свойств титанатов: схема сильного кристаллического поля (т.н. «статический орбитальный порядок») и схема сильного сверхобмена (т.н. «орбитальная жидкость»).

Горячие дискуссии между исследователями о том, какая из этих двух схем способна адекватно описывать орбитальные и магнитные свойства, привели к неоднозначной ситуации: с одной стороны, система является хорошо изученной во многих аспектах, а с другой стороны, неясно, как объединить имеющиеся факты в одну модель.

Одним из локальных экспериментальных методов исследования орбитального состояния является ядерный магнитный резонанс (ЯМР). ЯМР, наблюдаемый на ядрах немагнитных ионов позволяет сделать заключение о характеристиках магнитной структуры в целом.

Для интерпретации имеющихся экспериментальных данных [1,2] необходимо построить теоретическую модель, позволяющую с микроскопических позиций объяснить механизмы формирования статической магнитной структуры и магнитных сверхтонких взаимодействий (МСТВ) на немагнитных ионах ( $^{139}La$ ,  $^{89}Y$ ).

В данной работе были рассчитаны параметры магнитной структуры и магнитных сверхтонких полей для титанатов лантана и иттрия. Было учтено влияние кристаллической и орбитальной структур на величины МСТВ. Традиционный подход к теории формирования локальных магнитных сверхтонких полей был дополнен учётом анизотропного вклада.

1. Y. Furukawa, I. Okamura, K. Kumagai, Y. Taguchi, Y. Tokura. *J. of Low. Temp. Phys.*, **105**, 3/4 (1996)

2. Y. Furukawa, I. Okamura, K. Kumagai, T. Goto, T. Fukase, Y. Taguchi, Y. Tokura. *Phys. Rev. B*, **59**, 16 (1999)

**$^{17}\text{O}$  ЯМР ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ОКСИДОВ  $\text{BaPb}_{1-x}(\text{Bi,Sb})_x\text{O}_3$** 

*Арапова И.Ю.\**, Пискунов Ю.В., Оглобличев В.В., Садыков А.Ф., Геращенко А.П., Бузлуков А.Л.,  
Верховский С.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: arapova@imp.uran.ru

В настоящее время изучение причин формирования и развития неоднородного состояния электронной системы, их взаимосвязи с возникновением и особенностями сверхпроводящего состояния в перовскитоподобных оксидах является одним из центральных направлений развития современной физики конденсированного состояния. К числу наиболее перспективных методов исследования всякого рода неоднородностей в твёрдом теле относятся методы импульсной спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [1]. Ранее, по данным сдвигов ЯМР  $^{17}\text{O}$  было обнаружено зарождение щелевого поведения спиновой восприимчивости в составах  $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$  вблизи перехода в полупроводниковую фазу соединения [2]. С использованием методов двойного  $^{17}\text{O} - ^{207}\text{Pb}$  резонанса спинового эха для оксида  $\text{BaPb}_{0.67}\text{Bi}_{0.33}\text{O}_3$ , находящегося вблизи концентрационного перехода металл — полупроводник, получены прямые свидетельства о локальном характере энергетической щели, возникающей в микрообластях, содержащих катионы висмута [3]. Крайне важным представляется выяснить возможное появление подобных полупроводниковых кластеров в оксидах  $\text{BaPb}_{1-x}\text{Sb}_x\text{O}_3$ .

В данной работе проведены исследования на уникальной серии образцов  $\text{BaPb}_{1-x}\text{Sb}_x\text{O}_3$  ( $0.00 \leq x \leq 0.33$ ), дополнительно обогащенных ЯМР — изотопом  $^{17}\text{O}$ . В этом случае все атомы, входящие в состав оксидов, доступны для исследования методами ЯМР. Были получены спектры ЯМР  $^{207}\text{Pb}$ ,  $^{17}\text{O}$  с использованием методик спинового эха  $^{207}\text{Pb}$ ,  $^{17}\text{O}$  и двойного резонанса спинового эха  $^{17}\text{O} - ^{207}\text{Pb}$ ,  $^{17}\text{O} - ^{121}\text{Sb}$ ,  $^{207}\text{Pb} - ^{121}\text{Sb}$ . Для того чтобы выделить вклады в спектральную интенсивность атомов свинца и кислорода с различным ближним окружением катионов в допированном оксиде, была выполнена структурная идентификация отдельных линий в спектрах ЯМР  $^{207}\text{Pb}$ ,  $^{17}\text{O}$ , в образцах  $\text{BaPb}_{1-x}\text{Sb}_x\text{O}_3$  с различным содержанием примеси сурьмы. Определены константы косвенного гомоядерного ( $^{207}\text{Pb} - ^{207}\text{Pb}$ ) взаимодействия ядерных спинов  $^{Pb-Pb}J$  в зависимости от величины локального найтовского сдвига  $^{207}K_S$  [4]. Также измерена константа косвенного гетероядерного взаимодействия  $^{O-Pb}J$ .

Показано, что константы взаимодействий пропорциональны локальной спиновой восприимчивости. Данные о затухании амплитуды спинового эха ядер свинца и прямые оценки констант косвенного взаимодействия ядер ближайших соседей, атомов  $\text{Pb} - \text{Pb}$  и  $\text{O} - \text{Pb}$ , дают убедительные свидетельства в пользу развития микроскопически неоднородного по кристаллу основного состояния электронной системы в металлической фазе оксидов  $\text{BaPb}_{1-x}(\text{Bi,Sb})_x\text{O}_3$ .

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 08-02-00789-а) и молодёжного проекта УрО РАН № 7-М.*

1. Slichter C.P., Principles of Magnetic Resonance, Springer, NY (1996)
2. Piskunov Yu., et al., Phys. Rev. B, **65**, 134518, (2002)
3. Оглобличев В. В., дис. к. ф.-м. н. Екатеринбург 112 с. (2006)
4. Садыков А.Ф., Пискунов Ю.В., Оглобличев В.В., Арапова И.Ю., Геращенко А.П., Бузлуков А.Л., Верховский С.В., Леонидов И.А., Письма в ЖЭТФ, **91**, 5, 236 (2010)

## ОСОБЕННОСТИ ОРБИТАЛЬНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В $\text{LaMnO}_3$ ПО ДАННЫМ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА $^{139}\text{La}$

*Волкова З.Н.\*, Михалёв К.Н., Верховский С.В., Геращенко А.П.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: litvinovaz@mail.ru

В данной работе исследуется слабодопированный поликристаллический образец  $\text{LaMnO}_3$  в парамагнитной области. В ходе работы измерена магнитная восприимчивость образца  $\chi = M/H$  в температурном диапазоне 290–800 К в магнитном поле 4.5 кЭ. Записаны спектры ядерного магнитного резонанса (ЯМР) в температурном диапазоне 150–850 К в магнитных полях 94 кЭ и 117 кЭ. Параметры градиента электрического поля (ГЭП) – квадрупольная частота  $\nu_Q$  и параметр асимметрии  $\eta$ , а также изотропная компонента магнитного сдвига на лантане  $^{139}K_{iso}$  были определены с помощью компьютерного моделирования ЯМР спектра.

Температурная зависимость макроскопической магнитной восприимчивости  $\chi(T)$  и её обратной величины  $\chi^{-1}(T)$  представлены на рис. 1 (а). Значение температуры Ян-Теллеровского перехода близко к значению, приведённому в [1], и составляет  $T_{JT}$  730 К. Небольшая разница в температурах перехода связана со слабой нестехиометрией по кислороду исследуемого нами образца.

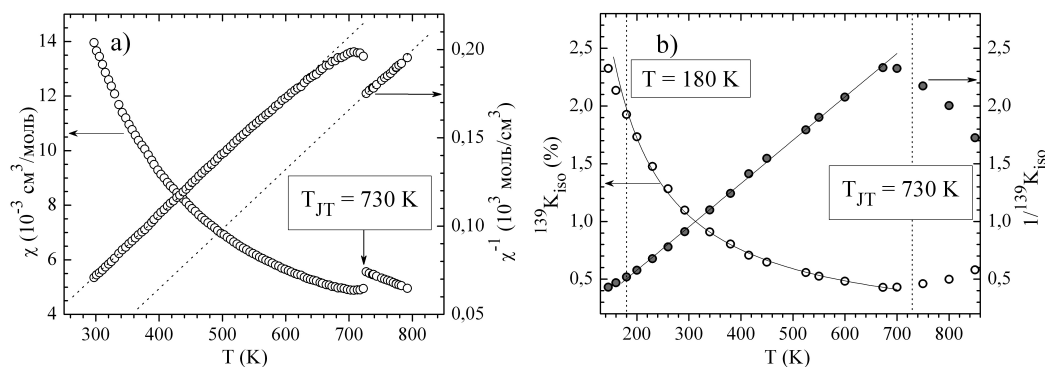


Рис. 1. (а) температурная зависимость магнитной восприимчивости  $\chi(T)$  и обратной величины магнитности  $\text{LaMnO}_3$ ; (б) температурная зависимость изотропного магнитного сдвига на лантане  $^{139}K_{iso}$  и обратной величины для  $\text{LaMnO}_3$

В парамагнитной области температурная зависимость магнитного сдвига на лантане  $^{139}K_{iso}(T)$  (рис. 1 (б)) описывается законом Кюри-Вейсса  $^{139}K_{iso}(T) \sim (T - \Theta)^{-1}$ , где  $\Theta \approx 50$  К. Небольшое отклонение от этого закона в области  $T < 180$  К, возможно, связано с формированием ближнего магнитного порядка при приближении к температуре Нееля  $T_N$  140 К [2]. При переходе через  $T_{JT}$  магнитный сдвиг возрастает, что свидетельствует об увеличении локального поля, наведённого на лантане. Параметры  $\nu_Q$  и  $\eta$  существенно не меняют своего значения при увеличении температуры до 650 К и равны 3.75 МГц и 0.93 соответственно. Однако при переходе через  $T_{JT}$  параметры ГЭП испытывают резкий скачок, уменьшаясь до  $\sim 3.3$  МГц и  $\sim 0.5$  соответственно.

*Работа поддержана РФФИ, проект № 09-02-00310.*

1. J.S. Zhou, J.B. Goodenough, Phys. Rev. B, **60**, R15002 (1999)
2. Михалёв К.Н. и др., Письма в ЖЭТФ, **72**, 12 (2000)

**ИНВЕРСНЫЙ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ  
В ФЕРРИТ-ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ДИСКЕ***Филиппов Д.А.\**, *Галкина Т.А.*

Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого, г. В. Новгород, Россия

\*E-mail: Dmitry.Filippov@novsu.ru

Магнитоэлектрический (МЭ) эффект относится к перекрёстным эффектам и заключается в возникновении поляризации под действием магнитного поля (прямой МЭ-эффект), и, наоборот, в возникновении намагниченности под действием электрического поля (инверсный или обратный МЭ-эффект). В настоящее время прямой МЭ эффект изучен достаточно подробно [1], однако инверсный МЭ эффект изучен ещё недостаточно. Имеется всего несколько публикаций [2-5], посвящённых инверсному МЭ эффекту. В работе [6] представлено теоретическое описание инверсного МЭ-эффекта для образцов в форме пластинки. Напрямую применить результаты работы [6] для образцов в форме диска не представляется возможным.

В данной работе дано детальное теоретическое описание инверсного МЭ-эффекта и приведены результаты расчётов частотной зависимости коэффициента инверсного МЭ преобразования для дискообразных образцов из объёмных композиционных материалов состава феррит-никелевая шпинель – цирконат-титаната свинца. Получены выражения для коэффициента инверсного МЭ преобразования, прямо пропорционального произведению значений пьезоэлектрического  $d_{31}$  и пьезомагнитного  $q_{i1}$  модулей и обратно пропорционального значению модуля податливости  $s_{11}$ . Однако при поперечном эффекте величина коэффициента  $\alpha_{B,T}$  пропорциональна произведению  $(q_{11} + q_{12})d_{31}$ , а при продольном значению  $\alpha_{B,L}$  пропорционально произведению  $q_{31}d_{31}$ . Поскольку  $(q_{11} + q_{12}) > q_{31}$ , то и величина поперечного эффекта больше, чем продольного. Показано, что частотная зависимость коэффициента инверсного МЭ преобразования, как и частотная зависимость МЭ коэффициента по напряжению  $\alpha_E$  при прямом эффекте, имеет резонансный характер. В области низких частот величина инверсного коэффициента МЭ преобразования практически не зависит от частоты, однако на резонансных частотах  $f_r$  наблюдается пиковое увеличение коэффициента. Для образцов из феррит-никелевой шпинели – ЦТС радиусом около  $R \approx 1$  см значение нижней резонансной частоты составляет примерно  $f_r \approx 300$  кГц. Следует отметить, что резонансное увеличение МЭ коэффициента по напряжению  $\alpha_E = \langle E \rangle / H$  наблюдается на частотах антирезонанса  $f_{ar}$ . Частоты резонанса и антирезонанса имеют хоть и близкие, но экспериментально различимые значения.

1. Туров Е.А., УФН, **164**, 325 (1994)
2. Dong S., Li J.F., Viehland D., Cheng J., Cross L.E., Appl. Phys. Lett., **85**, 3534 (2004)
3. Fetisov Y.K., Petrov V.M., Srinivasan G., Mater J. Res., **22**, 2074 (2007)
4. Буш А.А., Каменцев К.Е., Мещеряков В.Ф., Фетисов Ю.К., Чашин Д.В., Фетисов Л.Ю., ЖТФ, **79**, 71 (2009)
5. Fetisov Y.K., Kamentsev K.E., Chashin D.V., Fetisov L.Y., Srinivasan G., J. Appl. Phys., **105**, 123918 (2009)
6. Филиппов Д.А., Галкина Т.А., Srinivasan G., Письма в ЖТФ, **36**, 21, 23 (2010)

## ИССЛЕДОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ПРОПУСКАНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО КРИСТАЛЛА

*Зотов И.С.\**

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

\*E-mail: zotovis@mail.ru

Целью работы является экспериментальное исследование коэффициента пропускания композитного материала, изготовленного на основе диэлектрической матрицы, в которой сформирована регулярная проводящая структура, в виде графитовых стержней, представляющая собой электромагнитный кристалл [1].

Образцы для исследования представляют собой прямоугольную диэлектрическую матрицу ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) в которой был сформирован электромагнитный кристалл. Кристалл образован графитовыми проводящими стержнями диаметром 0.7 мм (линейное сопротивление  $\approx 10$  Ом/см), образующими квадратную решётку с постоянными решетки от 2 до 10 мм. Проводимость частиц графита имеет сильно выраженную анизотропию, поэтому, в зависимости от ориентации частиц в проводящем графитовом стержне, можно сильно варьировать электродинамические характеристики электромагнитного кристалла. Исследования проводились в диапазоне 8–12 ГГц, с использованием панорамного измерителя КСВН Р2-61 и углового спектрометра [2], изготовленного на кафедре радиофизики Челябинского государственного университета.

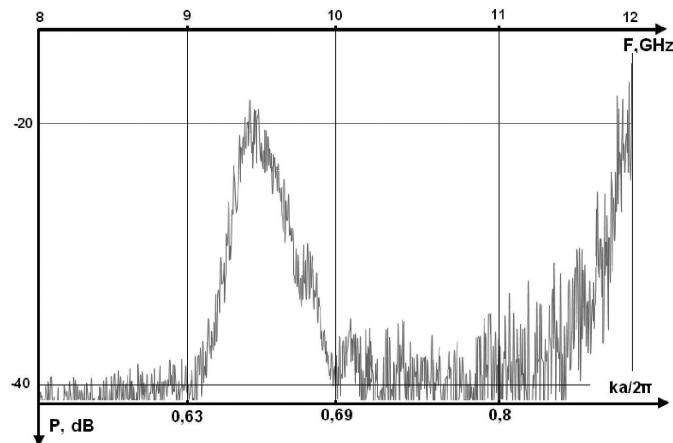


Рис. 1. График частотной зависимости коэффициента пропускания ( $T$ ) электромагнитного кристалла ( $a = 10$  мм)

В образцах с постоянной решётки 8–10 мм проявилась зонная структура характерная для электромагнитного кристалла. На рис. 1 приведена кривая зонной структуры образца с постоянной решётки 10 мм. На графике хорошо видно окно прозрачности (9–10 ГГц) и запрещенные зоны (8–9 и 10–12 ГГц), в которой коэффициент отражения равен 1. Аналогичные зависимости наблюдались и на образцах с постоянными решетки 8 и 9 мм. При уменьшении шага решетки наблюдается смещение окна прозрачности и запрещённой зоны в область более высоких частот. Результаты измерений качественно совпадают с выводами, полученными в работе [1] и окажутся полезными при создании эффективного радиопоглощающего и хорошо экранирующего композитного материала, в конечном слое которого, сформирован электромагнитный кристалл с коэффициентом отражения 1.

1. P.A. Belov, S.A. Tretyakov, A.J. Viitanen, J. of Electromagn. Waves and Appl., **16**, 8, 1153-1170 (2002)
2. A.F. Starr, P.M. Rye, J.J. Mock, D.R. Smith, Review of scientific instruments, **75**, 4, 820-825

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОГО РАССЛОЕНИЯ В  $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$  ПО ДАННЫМ ЯМРЛекомцев С.А.<sup>1</sup>, Михалёв К.Н.<sup>1\*</sup>, Волкова З.Н.<sup>1</sup>, Архипов В.Е.<sup>1</sup>, Королёв А.В.<sup>1</sup>, Муковский Я.М.<sup>2</sup><sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Московский государственный институт стали и сплавов, г. Москва, Россия

\*E-mail: mikhalev@imp.uran.ru

Манганиты со структурой перовскита интенсивно изучаются в последнее время благодаря эффекту колоссального магнитосопротивления (КМС), а также из-за богатого разнообразия физических явлений, обусловленных тесной взаимосвязью между орбитальными, спиновыми и зарядовыми степенями свободы. Одна из основных микроскопических моделей эффекта КМС – перколяционный переход от недопированной антиферромагнитной матрицы ( $\text{LaMnO}_3$ ) с зарождающимися ферромагнитными каплями к ферромагнитному проводнику с оставшимися антиферромагнитными кластерами была развита в работах Нагаева [1]. Однако существование ферромагнитного диэлектрического состояния (ФМД) на фазовой диаграмме манганитов не вполне понятно в рамках этой модели.

В настоящей работе измерены спектры ЯМР  $^{55}\text{Mn}$  в монокристаллическом  $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$  в локальном поле и во внешнем магнитном поле 4.3 Тл, спектры  $^{139}\text{La}$  во внешнем поле 9.4 Тл, а также температурная зависимость намагниченности с целью изучить особенности микроскопического фазового расслоения в ФМД состоянии и зарядового распределения вблизи орбитального упорядочения.

На температурной зависимости намагниченности можно четко выделить две особенности: температура Кюри ( $T_C \sim 230$  К), соответствующая максимуму производной намагниченности, и температура зарядового упорядочения ( $T_{CO} \sim 200$  К), которая соответствует точке перегиба, где намагниченность выходит на насыщение при понижении температуры.

Эволюция формы линии  $^{139}\text{La}$  в области температур 150–400 К отражает резкое изменение компонент тензора градиента электрического поля в точке перехода орбитальный порядок – орбитальный беспорядок. Сравнение спектров ЯМР  $^{55}\text{Mn}$  в локальном поле (в упорядоченном состоянии, при  $T = 4.2$  К) и во внешнем поле позволило провести идентификацию линий в спектрах. Известно, что линии ЯМР, связанные с доменными стенками исчезают в магнитном поле, если оно больше, чем поле анизотропии. Линии от антиферромагнитно-упорядоченных областей уширяются, а линии, связанные с ферромагнитно-упорядоченными областями – сдвигаются в область меньших частот из-за отрицательной сверхтонкой константы. Таким образом, сравнение двух записанных спектров показало, что низкочастотная линия с максимумом при 325(6) МГц соответствует ферромагнитно-упорядоченным изоляторным областям, часть линии вблизи 375 МГц – ферромагнитно-упорядоченным проводящим областям, что совпадает с идентификацией, сделанной для манганитов с близкой степенью дырочного допирования в других работах [2].

Таким образом, при описании перколяционного перехода антиферромагнитный диэлектрик – ферромагнитный металл в манганитах в отличие от [1], нужно учитывать появление микрообластей ФМД – типа.

*Работа поддержана РФФИ, проект № 09-02-00310.*

1. Nagaev E., Phys.Rep., **346**, 387 (2001)2. Kapusta Cz., Riedi P.C., Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **196-197**, 446 (1999)

## ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ МУЛЬТИФЕРРОИКА $\text{LiCu}_2\text{O}_2$ МЕТОДАМИ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

*Садыков А.Ф.\**, Пискунов Ю.В., Геращенко А.П., Оглобличев В.В., Бузлуков А.Л., Михалёв К.Н.,  
Верховский С.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Sadykov@imp.uran.ru

Представлены результаты экспериментальной работы по определению типа магнитной структуры квазиодномерного мультиферроика  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$  методами ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР). В ходе исследований были выполнены измерения спектров двух изотопов меди  $^{63,65}\text{Cu}$  и изотопа  $^7\text{Li}$  в монокристалле  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$  выше и ниже температуры перехода оксида в магнитное состояние  $T = 24$  К. На рисунке 1 показаны  $^{63,65}\text{Cu}$  ЯМР спектры, полученные во внешнем магнитном поле  $B_0 = 94$  кЭ, направленном вдоль оси  $c$  кристалла (рис.1а),  $^{63,65}\text{Cu}$  ЯМР спектры в нулевом магнитном (рис.1б) и  $^7\text{Li}$  ЯМР спектр на частоте  $\nu = 56$  МГц при  $B_0 \parallel c$  (рис.1с). В процессе анализа  $^{63,65}\text{Cu}$  и  $^7\text{Li}$  ЯМР/ЯКР спектров было выявлено, что в веществе реализуется сложная геликоидальная структура магнитных спиновых моментов. В результате теоретических расчётов формы линии ЯМР/ЯКР меди и лития в модели плоскостного геликса и симуляции экспериментальных спектров с помощью компьютерной программы была установлена пространственная ориентация геликса. Наилучшее согласие между теоретическими и экспериментальными спектрами достигается при следующей пространственной ориентации плоскости геликса магнитных моментов  $\text{Cu}^{2+}$ : угол  $\gamma$  между осью  $c$  кристалла и нормалью к плоскости геликса, лежащей в  $(ac)$  плоскости кристалла, равен  $\gamma = 35(2)^\circ$ . Более того, были определены величина локального поля на позициях  $\text{Cu}^+$   $|h_{loc}| = 12(1)$  кЭ и эффективный магнитный момент на ионе  $\text{Cu}^{2+}$   $\mu \approx 1.0(1)\mu_B$ .

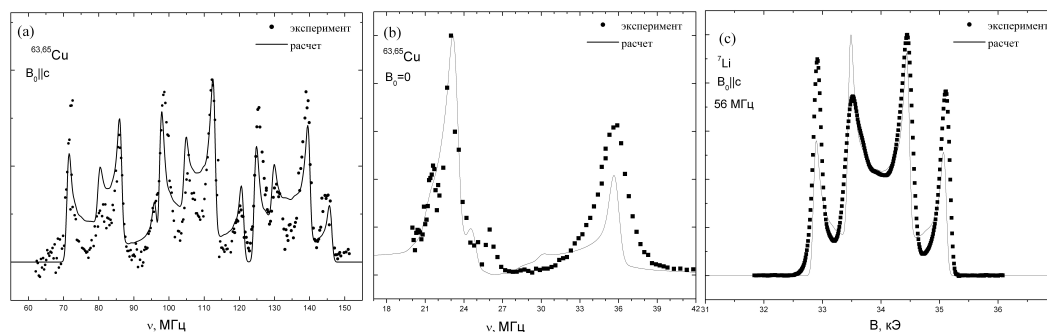


Рис. 1.  $^{63,65}\text{Cu}$  ЯМР спектры (а),  $^{63,65}\text{Cu}$  ЯКР спектры (б) и  $^7\text{Li}$  ЯМР спектры (с) в магнитоупорядоченной фазе монокристалла  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$ . Сплошные линии представляют собой спектры, полученные с помощью расчётов наведенных сверхтонких полей (на позициях  $\text{Cu}^+$ ) и дипольных полей (на ядрах Li) в модели плоскостного геликса

## $^{51}\text{V}$ ЯМР ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАДИЕНТА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ПАРАМАГНИТНОЙ ФАЗЕ СОЕДИНЕНИЙ $\text{M}_3\text{V}_2\text{O}_8$ ( $\text{M}=\text{Co}, \text{Ni}$ )

Смольников А.Г., Оглобличев В.В.\*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: ogloblichev@imp.uran.ru

Геометрически фрустрированные магнитные системы с общей структурной формулой  $\text{M}_3\text{V}_2\text{O}_8$  ( $\text{M}=\text{Ni}, \text{Co}$ ), активно изучаются последнее время в физике твёрдого тела из-за открытия в них целого спектра фазовых переходов, включающих как несоразмерные, так и ферроэлектрическую фазы [1-5]. Эти системы с кристаллической структурой Кагоме-лестницы чрезвычайно чувствительны к относительно слабым взаимодействиям и, таким образом, могут демонстрировать новые и необычные примеры дальнего и ближнего магнитного порядка.

Нами выполнены эксперименты по измерению спектров ЯМР и затуханию сигнала спинового эха ядра ванадия  $^{51}\text{V}$  (Рис.1 а) в монокристаллах  $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_8$  (CVO) и  $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_8$  (NVO) в области температур (30–300)К в магнитном поле  $H_0 = 20$  кЭ. Из анализа ориентационных зависимостей формы линии ЯМР  $^{51}\text{V}$  (Рис.1 б) определены параметры градиента электрического поля (ГЭП). Для NVO значение квадрупольной частоты  $\nu_Q = 180(10)$  кГц и параметра асимметрии  $\eta = 0.5(1)$  для CVO –  $\nu_Q = 120(10)$  кГц и  $\eta = 0.4(1)$ . Анализ результатов расчёта тензоров ГЭП в модели точечных зарядов и ЯМР данных показал, что в соединениях  $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_8$  и  $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_8$ , в которых нет кристаллографически неэквивалентных атомов ванадия, существует две различные ориентации осей ГЭП:  $V_{ZZ}$  лежит в плоскости  $bc$  и составляет с осью  $c$  угол  $\pm 54(5)^\circ$  для NVO и  $\pm 53(5)^\circ$  для CVO. В области температур (30–300)К в структуре NVO и CVO локальная симметрия и зарядовое окружение на позициях ванадия существенно не изменяется.

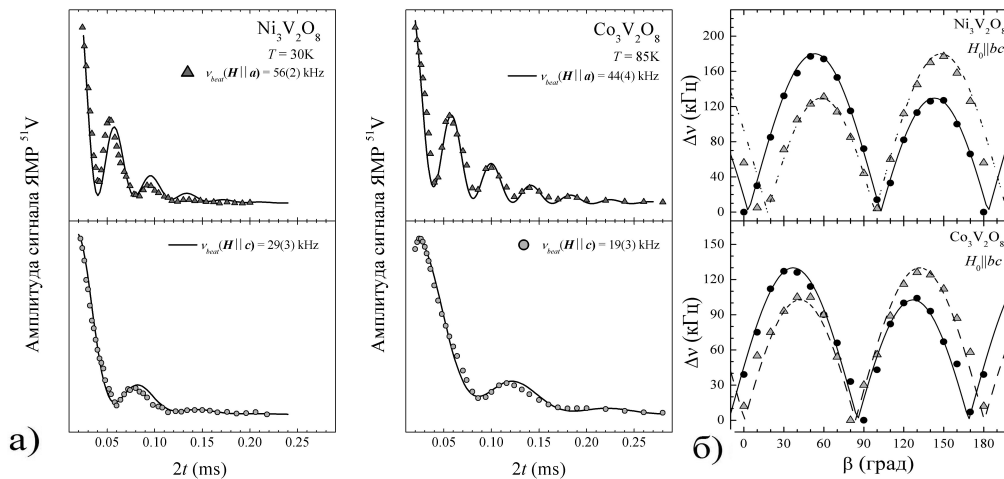


Рис. 1. а) Зависимость амплитуды спинового эха  $^{51}\text{V}$  от удвоенной задержки между импульсами  $2t$  на ядре  $^{51}\text{V}$  в монокристаллах  $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_8$  при температуре  $T = 30$  К и  $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_8$  при  $T = 85$  К в двух ориентациях кристаллов  $H_0 \parallel a$  и  $H_0 \parallel c$ ; б) Зависимость расстояния между сателлитами,  $\Delta\nu$ , в ориентации  $H_0 \parallel bc$  от угла между направлением магнитного поля и кристаллографической осью  $c$

1. Chen Y., Lynn J.W., Huang Q. et al., Phys. Rev. B, **74**, 014430 (2006)
2. Kenzelmann M., Harris A.B., Aharony A. et al., Phys. Rev. B, **74**, 014429 (2006)
3. Harris A.B., Phys. Rev. B, **76**, 054447 (2007)
4. Ogloblichev V., Kumagai K., Verkhovskii S. et al., Phys. Rev. B, **81**, 144404 (2010)
5. Ogloblichev V., Kumagai K. et al., J. Phys.: Conf. Ser., **150**, 42148 (2009)



**МАГНИТОРЕЗОНАНСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА  
В МОНОКРИСТАЛЛЕ  $\text{LaGa}_{0.995}\text{Mn}_{0.005}\text{O}_3$  (M=Co,Ni)**

*Фокин А.В.\**

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: andrey.fokin@rambler.ru

Интерес к изучению галлата лантана и изоморфных твердых растворов  $\text{LaMnO}_3 - \text{LaGaO}_3$  связан с возможностью на основе  $\text{LaGaO}_3$ , путём легирования стронцием и ионами переходных элементов, создавать твёрдые электролиты, перспективные в создании твердоотопливных кислородных ячеек, мембран для отделения кислорода и кислородных насосов, а также тем, что манганит лантана является исходным соединением для создания материалов с гигантским магниторезистивным эффектом.

В слабелегированных марганцем монокристаллах галлата лантана в [1,2] были обнаружены примесные центры  $\text{Mn}^{4+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$  (позиция  $\text{Ga}^{3+}$ ) и  $\text{Gd}^{3+}$  (позиция  $\text{La}^{3+}$ ), определены параметры спинового гамильтониана  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{4+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$  в двух фазах галлата лантана.

В данной работе методом ЭПР детально исследован фазовый переход  $P_{\text{bnm}}(D_{2h}^{16}) \leftrightarrow R\bar{3}c(D_{3d}^6)$ . Наблюдающийся в галлате лантана парамагнитный резонанс перечисленных выше центров демонстрирует в фазовом переходе скачкообразное изменение резонансных положений ЭПР сигналов, сосуществование фаз и температурный гистерезис. Указанные факты позволяют прийти к заключению о реализации в исследованном  $\text{LaGaO}_3$  структурного фазового перехода первого рода.

Параметры начального расщепления основного состояния центра иона  $\text{Gd}^{3+}$  в орторомбической фазе  $\text{LaGaO}_3$  были использованы для определения «внутренних» параметров суперпозиционной модели начального расщепления (в двух вариантах аппроксимаций, предложенных авторами работ [3] и [4, 5]), связывающей параметры начального расщепления спектра с координатами лигандов. Полученные величины внутренних параметров использовались для оценки параметров начального расщепления  $b_{20}$  центров иона  $\text{Gd}^{3+}$  в низкосимметричных фазах  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{LaAlO}_3$  и высокотемпературной фазе  $\text{LaGaO}_3$ . Сравнение предсказаний двух аппроксимаций суперпозиционного приближения с результатами эксперимента в ромбоэдрических фазах  $\text{LaGaO}_3$  и  $\text{LaAlO}_3$ , а также тетрагональной  $\text{BaTiO}_3$ , позволило прийти к заключению об их адекватности и сделать вывод о лучшей применимости аппроксимации, предложенной в [3].

1. Важенин В.А., Потапов А.П., Гусева В.Б., Артёмов М.Ю., ФТТ, **52**, 480 (2010)
2. Важенин В.А., Потапов А.П., Гусева В.Б., Артёмов М.Ю., ФТТ, **51**, 869 (2009)
3. Levin L.I., Phys. Stat. Solidi (b), **134**, 275 (1986)
4. Newman D.J., Urban W., Adv. Phys., **24**, 793 (1975)
5. Newman D.J., Ng B., Crystal Field Handbook, Cambridge University Press (2000)



# **ФИЗИКА НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР**



**АНИЗОТРОПИЯ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ГЕКСАБОРИДЕ НЕОДИМА NdB<sub>6</sub>**

*Анисимов М.А.<sup>1\*</sup>, Глушков В.В.<sup>1</sup>, Богач А.В.<sup>1</sup>, Демишев С.В.<sup>1</sup>, Самарин Н.А.<sup>1</sup>, Филипов В.Б.<sup>2</sup>, Шицевалова Н.Ю.<sup>2</sup>, Случанко Н.Е.<sup>1</sup>*

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

<sup>2</sup>Институт проблем материаловедения НАНУ, г. Киев, Украина

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

Интерес к исследованию редкоземельных гексаборидов определяется перспективами их применения в качестве термоэлектриков, эффективных фотокатодов и поглотителей нейтронов. В то же время эти соединения интересны с точки зрения особенностей формирования магнитоупорядоченного состояния. Исследуемый в данной работе гексаборид неодима (NdB<sub>6</sub>) демонстрирует антиферромагнитное (АФМ) упорядочение при  $T_N \sim 8$  К в соразмерную (С) магнитную структуру с вектором  $\mathbf{k}=[0, 0, 1/2]$ . Наличие анизотропии  $H - T$  фазовой диаграммы NdB<sub>6</sub> установлено по результатам измерений тепловых [1], магнитных [2] характеристик и эффекта де Гааза-ван Альфена. В частности, в данном соединении выделенным оказывается направление магнитного поля  $\mathbf{H} \parallel \langle 111 \rangle$ , для которого в [1, 2] обнаружен метамагнитный переход при  $T < T^* \sim 4$  К, в магнитных полях  $H \geq H^* \sim 150$  кЭ. Однако в литературе практически отсутствуют данные о характере магнитной анизотропии в области магнитных полей  $H < H^*$  в АФМ фазе.

С этой целью в работе выполнены измерения угловых и полевых зависимостей магнитосопротивления  $\delta\rho(H, \varphi)/\rho$  на монокристаллах NdB<sub>6</sub> высокого качества ( $T_N \sim 7.7$  К) в магнитном поле до 80 кЭ в интервале температур 2–30 К.

Выполненные измерения

$\delta\rho(H, \varphi)/\rho$  в АФМ фазе NdB<sub>6</sub> указывают на резкое изменение рассеяния носителей в окрестности направлений магнитного поля  $\mathbf{H} \parallel \langle 111 \rangle$  и  $\mathbf{H} \parallel \langle 100 \rangle$  соответственно (рис.1). При этом вблизи направления  $\mathbf{H} \parallel \langle 100 \rangle$  на кривых  $\rho(\varphi)/\rho(0)$  наблюдается локальный минимум, амплитуда которого возрастает при повышении напряжённости магнитного поля. Рост температуры приводит к уширению особенности на кривой  $\rho(\varphi)/\rho(0)$  и её качественному изменению при  $T > T^* \sim 4$  К. При этом в интервале  $T < T^*$  наблюдается усиление анизотропии сопротивления в магнитном поле  $H = 40$  кЭ и 60 кЭ. Указанная температура оказывается выделенной вследствие наличия особенностей на температурных зависимостях магнитосопротивления ( $\mathbf{H} \parallel \langle 001 \rangle$ ) и упругой константы  $C_{44}$  [3]. Такое поведение, по-видимому, может быть связано с трансформированием магнитной структуры в АФМ фазе NdB<sub>6</sub>. По результатам исследований построена  $H - T$  магнитная фазовая диаграмма NdB<sub>6</sub>.

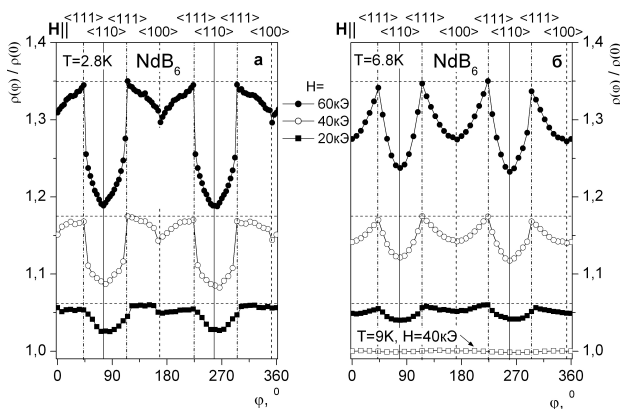


Рис. 1. Угловые зависимости нормированного сопротивления  $\rho(\varphi)/\rho(0)$  в АФМ фазе NdB<sub>6</sub>

зывается выделенной вследствие наличия особенностей на температурных зависимостях магнитосопротивления ( $\mathbf{H} \parallel \langle 001 \rangle$ ) и упругой константы  $C_{44}$  [3]. Такое поведение, по-видимому, может быть связано с трансформированием магнитной структуры в АФМ фазе NdB<sub>6</sub>. По результатам исследований построена  $H - T$  магнитная фазовая диаграмма NdB<sub>6</sub>.

1. Yonemura T. et al., J. Phys. Soc. Jpn., **78**, 114705 (2009)
2. Awaji S. et al., J. Phys. Soc. Jpn., **68**, 2518 (1999)
3. Nakamura S. et al., J. Phys. Soc. Jpn., **63**, 623 (1994)

### АНОМАЛИИ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ $GdB_6$

Анисимов М.А.<sup>1\*</sup>, Глушков В.В.<sup>1</sup>, Богач А.В.<sup>1</sup>, Демишев С.В.<sup>1</sup>, Самарин Н.А.<sup>1</sup>, Филипов В.Б.<sup>2</sup>,  
Шицвалова Н.Ю.<sup>2</sup>, Случанко Н.Е.<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Институт проблем материаловедения НАНУ, г. Киев, Украина

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

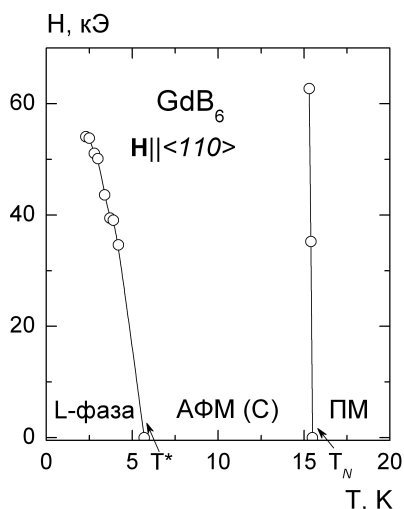


Рис. 1. Магнитная  $H - T$  фазовая диаграмма  $GdB_6$

ных свойств делают необходимым проведение более детальных исследований магнитосопротивления  $GdB_6$ .

В работе выполнены измерения полевых зависимостей магнитосопротивления  $\Delta\rho(H)/\rho$  в магнитном поле до 8 Т вдоль направления  $\mathbf{H} \parallel \langle 110 \rangle$  в области температур 2–35 К. Для исследований использовались монокристаллические образцы  $GdB_6$  высокого качества ( $T_N \sim 15.5$  К,  $T^* \sim 5.7$  К).

Полученные данные  $\Delta\rho(H)/\rho$  позволяют обнаружить смену режимов с переходом от малого отрицательного магнитосопротивления (ОМС) в парамагнитной (ПМ) фазе к большому положительному магниторезистивному эффекту ( $\Delta\rho/\rho \sim 11.7\%$ ) в магнитоупорядоченном состоянии при  $T > T^*$ . Анализ  $\Delta\rho(H)/\rho$  позволяет выделить три вклада в магнитосопротивление. Так, в ПМ фазе полевая зависимость магнитосопротивления описывается отрицательным квадратичным вкладом ( $-\Delta\rho/\rho \sim H^2$ ). С переходом в АФМ фазу появляется нелинейный ферромагнитный вклад с насыщением наряду с доминирующим положительным линейным вкладом в магнитосопротивление. Наличие нескольких компонент в магнитосопротивлении находит объяснение в предположении о формировании в АФМ фазе  $GdB_6$  ферронов в  $5d$ -полосе в окрестности РЗ ионов. По результатам комплексных исследований  $\Delta\rho(H)/\rho$  восстановлена магнитная  $H - T$  фазовая диаграмма  $GdB_6$  (рис.1).

1. Kuni S. et al., J. Magn. Magn. Mat., **52**, 275 (1985)

2. Kuwahara K. et al., Physica B, **359-361**, 965 (2005)

Гексаборид гадолиния ( $GdB_6$ ) является модельным объектом для изучения особенностей формирования антиферромагнитного (АФМ) состояния в редкоземельных (РЗ) гексаборидах в отсутствие орбитального момента (состояние  $^8S_{7/2}$  РЗ иона).

Однако, информация о физических свойствах данного соединения оказывается противоречивой и неполной, в том числе потому, что основные работы по  $GdB_6$  выполнены на поликристаллических образцах низкого качества. Так, авторами [1,2] установлено, что  $GdB_6$  испытывает АФМ упорядочение при  $T_N \sim 15 \text{ К} \div 16 \text{ К}$  с последующим магнитным переходом в L-фазу при  $T^* \sim 7 \div 11 \text{ К}$ .

По результатам исследований магнитной дифракции [2] установлена неколлинеарная магнитная структура с волновым вектором  $\mathbf{k}=[1/4, 1/4, 1/4]$  в области температур  $T^* < T < T_N$ . Исследования гальваномагнитных свойств  $GdB_6$ , выполненные ранее авторами [1], указывают на сложный характер зависимости  $\Delta\rho(H)/\rho$  в магнитоупорядоченных фазах  $GdB_6$ . В то же время, недостаточно подробные измерения гальваномагнитных свойств делают необходимым проведение более детальных исследований магнитосопротивления  $GdB_6$ .

**ИССЛЕДОВАНИЕ НОВОГО ТИПА ВОЗБУЖДЕНИЙ  
НА ПОВЕРХНОСТИ КВАНТОВЫХ ЖИДКОСТЕЙ***Григорьев А.Д.<sup>1\*</sup>, Григорьев П.Д.<sup>2</sup>, Дюгаев А.М.<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Самарский государственный университет, г. Самара, Россия<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, г. Москва, Россия

\*E-mail: algrigd@yandex.ru

В работе изучается новый вид возбуждений на поверхности жидкого гелия, предложенный в качестве гипотезы в работе [1] и затем дополнительно исследованный в работах [2],[3],[4]. Эти возбуждения, названные сюрфонами [4], впервые объяснили сильную температурную зависимость коэффициента поверхностного натяжения обоих изотопов жидкого гелия [1], ширину и сдвиг линии электронного перехода между связанными состояниями на поверхности твёрдого водорода [2], и некоторые особенности температурной зависимости подвижности электронов на поверхности жидкого гелия [3]. Сюрфоны возникают как следствие того, что атомы гелия имеют дискретный квантовый уровень вблизи поверхности. В направлении, перпендикулярном поверхности, атомы притягиваются к поверхности жидкости силами Ван дер Ваальса, но вблизи самой поверхности отталкиваются на расстоянии размера атома. Сюрфон представляет собой атом на поверхности с учётом реакции этой поверхности, аналогичной полярону в металлах. Концентрация сюрфонов увеличивается с температурой, поскольку рождение сюрфонов есть термически-активационный процесс, определяемый энергией активации, равной разнице между энергией сюрфона и химическим потенциалом в объеме жидкости. Сюрфоны могут двигаться вдоль поверхности, образуя двумерный газ. В работе предложена приближенная микроскопическая модель структуры сюрфонов. На основе этой модели вычислена энергия активации сюрфонов и их эффективная масса для обоих изотопов гелия. Также более точно вычислен вклад сюрфонов в температурную зависимость поверхностного натяжения обоих изотопов жидкого гелия, учитывая температурную зависимость плотности и химического потенциала жидкого гелия, которые входят в коэффициент поверхностного натяжения через энергию активации сюрфонов.

Также изучено взаимодействие между сюрфонами, которое оказывается важным при повышении температуры, когда концентрация сюрфонов становится сравнимой с концентрацией плотной упаковки поверхностного слоя. Сравнение с экспериментом позволяет получить феноменологическое значение энергии активации, а эффективная масса сюрфона оказывается в точности равной массе атома гелия. Этот результат означает, что поверхность гелия не успевает подстроиться под движущийся сюрфон. При этом значение энергии активации находится в полном согласии с расчётом, проведённым на основе предложенной микроскопической модели сюрфонов, что убирает подгоночные параметры из теории. Тем не менее, в температурном интервале применимости приближения парного взаимодействия сюрфонов, теория хорошо описывает экспериментальную температурную зависимость коэффициента поверхностного натяжения обоих изотопов жидкого гелия. Исследовано также взаимодействие сюрфонов с поверхностными волнами (риплонами). Оценено время испарения сюрфонов с поверхности  $He_4$ , связанное с рассеянием на риплонах. Полученное время жизни сюрфонов много больше их обратной энергии, что позволяет считать сюрфоны новыми квазичастицами на поверхности жидкостей.

1. А.М. Дюгаев, П.Д. Григорьев, Письма в ЖЭТФ, **78** (7), 935 (2003)
2. П.Д. Григорьев, А.М. Дюгаев, Е.В. Лебедева, Письма в ЖЭТФ, **87** (2), 114 (2008)
3. P.D. Grigoriev, A.M. Dyugaev, E.V. Lebedeva, ЖЭТФ, **133** (2), 370-379 (2008) [JETP, **106**(2), 316-325 (2008)]; P.D. Grigoriev, A.M. Dyugaev, E.V. Lebedeva, HAIT Journal of Science and Engineering A, **5**, 143-163 (2008)
4. A.D. Grigoriev, A.M. Dyugaev, P.D. Grigoriev, arXiv:0905.2306 (2009)

**АВТОКОЛЕБАНИЯ И ЗАМОРАЖИВАНИЕ ТОКА,  
ПРОТЕКАЮЩЕГО ПО СВЕРХПРОВОДЯЩЕМУ КОЛЬЦУ**

*Коверя В.П.<sup>1\*</sup>, Бондаренко С.И., Кревсун А.В., Левченко Н.М.*

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина, г. Харьков, Украина

\*E-mail: koverya@ilt.kharkov.ua

Экспериментально исследовано распределение тока, протекающего через две ветви сверхпроводящего кольца, имеющие различные критические токи и индуктивности. При введении постоянного тока  $I$  через точки, разбивающие проволоочное танталовое кольцо на две макроскопические ветви (с индуктивностями  $5 \times 10^{-6}$  Гн и  $10^{-8}$  Гн и с критическими токами 400 мА и 20 мА), и приближении сверхпроводящего тока в короткой ветви, имеющей «ослабленный» с помощью локального травления участок провода, к критическому значению  $I_{C2}$  часть его периодически переключается в ветвь с большей индуктивностью. Вид незатухающих автоколебаний (АК) тока  $I_1$  в ветви с большей индуктивностью и схема кольца показаны на Рис. 1а и вставке. При введении постоянного тока  $I$  через точки, разбивающие танталовое или ниобиевое кольцо на одну микроскопическую ветвь в виде прижимного точечного контакта (ТК) с индуктивностью  $\sim 10^{-12}$  Гн и другую, с макроскопическими размерами (с индуктивностью  $5 \times 10^{-6}$  Гн), и при приближении тока к критическому значению  $I_{C2}$  для ТК он начинает течь не только через ТК, но и через ветвь с большей индуктивностью. Если выключить ток через кольцо, то его часть  $I_1$ , попавшая в ветвь с большей индуктивностью, замораживается в кольце (Рис. 1б). Величина этого тока может быть плавно или дискретно увеличена путём установления соответствующего тока  $I$  через кольцо перед его выключением. Возникновение АК объясняется возможным увеличением индуктивности «ослабленного» участка ветви при приближении тока к критическому значению с последующим индуктивным перераспределением тока в ветвях и восстановлением исходного положения тока для достижения минимума магнитной энергии кольца [1]. Замораживание тока в кольце второй структуры объясняется выполнением закона сохранения магнитного потока, созданного током в ветви с большей индуктивностью, после выключения тока через кольцо [2]. Измерение тока в ветвях производилось с помощью регистрации магнитометром (М) магнитного поля тока.

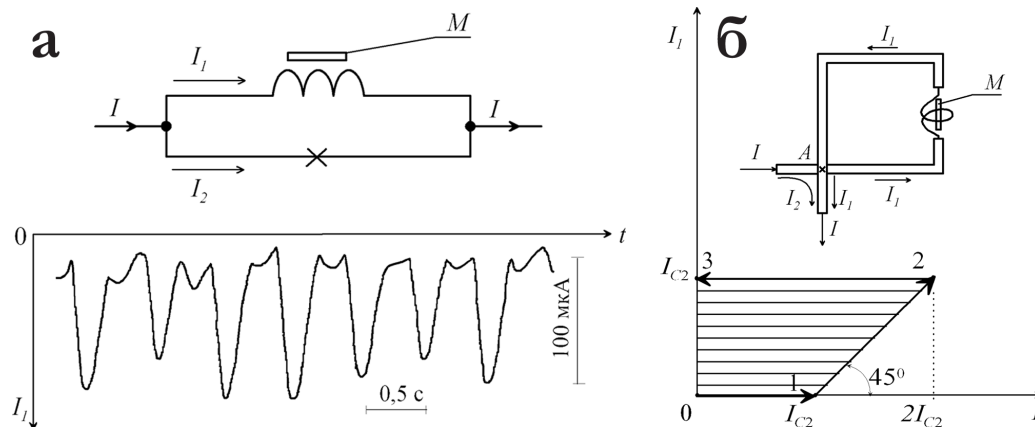


Рис. 1. а) Вид автоколебаний и схема кольца, × – место травления; б) Зависимость тока  $I_1$  от величины  $I$  и схема кольца с ТК

1. С.И. Бондаренко, В.П. Коверя, А.В. Кревсун, Н.М. Левченко, А.А. Шабло, ФНТ, **36**, 202 (2010)
2. В.П. Коверя, С.И. Бондаренко, А.В. Кревсун, Н.М. Левченко, И.С. Бондаренко, ФНТ, **36**, 759 (2010)



**ВЛИЯНИЕ ЗАТУХАНИЯ ФОНОННЫХ СОСТОЯНИЙ  
НА АНИЗОТРОПИЮ ПОГЛОЩЕНИЯ ПРОДОЛЬНОГО УЛЬТРАЗВУКА  
В КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ**

Кулеев И.Г., Кулеев И.И.\*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kuleev@imp.uran.ru

В модели анизотропного континуума проанализировано влияние затухания фононных состояний на поглощение продольного ультразвука в кубических кристаллах с положительной (Ge, Si, InSb, MgO) и отрицательной анизотропией (KCl) модулей упругости второго порядка. Рассмотрены ангармонические процессы рассеяния с участием трёх продольных фононов (механизм  $LLL$ ), а также процессы рассеяния продольного фонона двумя поперечными тепловыми фононами (механизм  $LT$ ). В отличие от ранее опубликованных работ [1-3], в настоящем исследовании точно учтено влияние кубической анизотропии гармонической и ангармонической энергий фононов на релаксационные процессы. Основное внимание уделено исследованию особенностей рассеяния продольных фононов и изменения анизотропии поглощения ультразвука в зависимости от величины параметров затухания фононных состояний  $\gamma_{L,t} = \omega_{qL} \tau_{L,t}(T)^{-1}$  ( $\tau_{L,t}(T)$  – полные времена релаксации тепловых продольных ( $L$ ) и поперечных ( $t$ ) фононов,  $T$  – температура,  $\omega_{qL}$  – частота продольного фонона с волновым вектором  $q$ ). Рассчитаны зависимости коэффициентов поглощения ультразвука для симметричных направлений от параметров затухания в интервалах значений  $10^{-4} < \gamma < 1$ . При  $\gamma_L \ll 1$  коэффициенты поглощения для механизма  $LLL$  в кристаллах Ge, Si и InSb, достигают максимумов в направлениях [101], а минимумов – в [001]. Тогда как в ионных кристаллах MgO и KCl они достигают максимумов в направлениях [001], а минимумов – в [101]. При больших значениях параметра затухания анизотропия поглощения уменьшается, и коэффициенты поглощения в кристаллах Ge, Si и InSb становятся почти изотропными при  $\gamma_L \cong 0.3$ , а в KCl – при  $\gamma_L \cong 0.9$ . Причем, для механизма  $LLL$  при  $\gamma_L \cong 10^{-3}$  анизотропии поглощения ультразвука велика: отношение максимальных значений коэффициентов поглощения к минимальным для Ge, Si, InSb и MgO составляет порядок величины, а для KCl – два порядка величины. Показано, что существенное изменение анизотропии поглощения ультразвука в механизме релаксации  $LLL$  с увеличением затухания фононных состояний связано с изменением характера рассеяния фононов. При малом затухании фононных состояний в механизме  $LLL$  доминирует малоугловое рассеяние фононов, т.е. рассеяние почти коллинеарных фононов, и анизотропия поглощения обусловлена ангармонической энергией. С увеличением параметра  $\gamma_L$  расширяется область углов, на которые могут рассеиваться фононы в процессах релаксации  $LLL$ , и при  $\gamma_L \approx 1$  значительную роль играет рассеяние фононов на большие углы. В связи с этим при достаточно большом затухании анизотропия поглощения существенно уменьшается за счет усреднения квадратов матричных элементов, определяющих вероятность трехфононных процессов рассеяния. В этом случае она обусловлена анизотропией как гармонической, так и ангармонической энергий.

Сравнение полученных результатов по анизотропии поглощения ультразвука с экспериментальными данными показало, что механизм релаксации  $LLL$  является доминирующим механизмом поглощения ультразвука в кристаллах MgO и Ge. Для кристаллов Si и InSb из экспериментальных данных не удается сделать однозначный вывод в пользу одного из механизмов релаксации.

1. H.J. Maris, Phys. Acoustics, **VII**, 280 (1971)
2. B. Truel, C. Elbaum, B.B. Chick, Ultrasonic methods in sold state physics, Academic press, NY – London (1969)
3. В.В. Леманов, Г.А. Смоленский, УФН, **108**, 465, (1972)



**СТРУКТУРНЫЕ  
И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
ТВЁРДЫХ ТЕЛ**



**ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИТОВ Bi,Pb-2223/Ag,  
ОТОЖЖЁННЫХ В АТМОСФЕРЕ N<sub>2</sub>:O<sub>2</sub>**

Криницина Т.П.<sup>1</sup>, Кузнецова Е.И.<sup>1</sup>, Блинова Ю.В.<sup>1\*</sup>, Сударева С.В.<sup>1</sup>, Раков Д.Н.<sup>2</sup>, Белотелова Ю.Н.<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>ВНИИ Неорганических материалов им. ак. Бочвара, г. Москва, Россия

\*E-mail: jml@imp.uran.ru

Основное требование к сверхпроводящим композиционным лентам на основе фазы Bi,Pb-2223 в серебряной оболочке – это высокая токонесущая способность в больших магнитных полях. Полезные свойства высокотемпературных сверхпроводников первого поколения (Bi, Pb – керамика/Ag) позволили создать уже в настоящее время работающие в реальных энергосетях действующие силовые кабели. Однако важными задачами по-прежнему остаются следующие: повышение плотности критического тока, улучшение зависимости  $j_c(H)$ , сохранение структуры и сверхпроводящих свойств по длине проводника, оптимизация технологии изготовления ВТСП-композиатов с высокими свойствами. В последнее время интенсивное развитие получило направление, связанное с дальнейшим повышением фазовой чистоты керамики 2223 в композите. Оно заключается в использовании атмосферы отжига с пониженным содержанием кислорода либо во время всего процесса отжига, либо на заключительной стадии. Это достигается применением смеси (O<sub>2</sub> + N<sub>2</sub>). В [1] показано, что термообработка в атмосфере (7%O<sub>2</sub> + 93%N<sub>2</sub>) при 832°C благоприятствует образованию фазы Bi, Pb – 2223 и сокращает количество дополнительных фаз (2201, 2212, Ca<sub>2</sub>PbO<sub>4</sub>, (Sr,Ca)<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>, CuO), которые обычно располагаются по границам кристаллитов. Здесь же отмечается, что имеется значительное различие в эволюции фаз в процессе отжига при 840 °C на воздухе и при 832 °C в атмосфере O<sub>2</sub> + N<sub>2</sub>.

В настоящей работе исследованы композиты Bi, Pb – 2223/Ag, которые отжигались в атмосфере с пониженным содержанием кислорода (7.5%O<sub>2</sub> + 92.5%N<sub>2</sub>) либо на последнем этапе синтеза, либо в течение синтеза. Причём заключительный отжиг в атмосфере (O<sub>2</sub> + N<sub>2</sub>) проводился как при нормальном атмосферном давлении, так и при давлении 10 атм. Для сравнения исследовался композит, отожжённый только на воздухе (без заключительного отжига в (O<sub>2</sub> + N<sub>2</sub>)). Поставлена задача: выяснить, что привносит в композит отжиг в атмосфере (O<sub>2</sub> + N<sub>2</sub>), какие особенности структуры при этом возникают, и как они влияют на критический ток.

Структура композитов исследовалась рентгенографически (ДРОН-3М), с помощью просвечивающей электронной микроскопии (JEM-200СХ), методом сканирующей электронной микроскопии с микроанализом (Quanta 200).

Обнаружены две особенности структуры фазы 2223 после отжига в атмосфере (7.5%O<sub>2</sub> + 92.5%N<sub>2</sub>). Это наличие волн атомных смещений, связанных с недостатком кислорода или замещением его азотом, и более активное проникновение Ag в керамику в результате отжига в атмосфере (O<sub>2</sub> + N<sub>2</sub>) при давлении 10 атм. Неустойчивое состояние решётки с волнами смещений кислородных атомов обусловлено длительными отжигами в атмосфере с пониженным содержанием кислорода; обычно неустойчивость решётки положительно влияет на сверхпроводящие свойства при прочих благоприятных факторах структуры керамики.

1. Ionescu M., McKinnon J., Zhou S., Dou S.X. Physica C, **400**, 81 (2003)

**ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ЗАРОЖДЕНИЯ  
КОРРОЗИОННО-УСТАЛОСТНЫХ ТРЕЩИН  
В МАЛОУГЛЕРОДИСТЫХ СТРОИТЕЛЬНЫХ СТАЛЯХ**

*Бутусова Е.Н.\**, *Котков Д.Н.*, *Нохрин А.В.*, *Чувильдеев В.Н.*

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия

\*E-mail: Anelka13@yandex.ru

Проблема коррозионно-усталостного разрушения металлов и сплавов – одна из актуальных задач физического материаловедения. Фундаментальный аспект этой задачи связан с изучением влияния параметров структуры металла на его склонность к зарождению и распространению усталостных трещин. Особая актуальность этой задачи также связана с необходимостью решения практической задачи обеспечения безопасной работы металлоконструкций, эксплуатируемых в экстремальных условиях. Целью настоящей работы является исследование влияния структуры на механизмы коррозионно-усталостного разрушения малоуглеродистых сталей.

В качестве объектов исследования выступали низколегированные малоуглеродистые стали различного химического и фазового состава (17Г1С, 10Г2ФБ, 19Г и др.), находящиеся в различных структурных состояниях (до и после длительной эксплуатации). Коррозионно-усталостные испытания проводилось по схеме «консольный изгиб» в 3%-ном водном растворе NaCl в интервале амплитуд напряжений до предела прочности. В ходе испытаний определялось число циклов нагружения до зарождения трещины ( $N_0$ ), количество циклов до разрушения образца ( $N^*$ ), а также зависимость скорости роста трещины от напряжения  $V_{тр}(\sigma)$ .

Показано, что  $N_0$  и  $V_{тр}$  существенно зависят от параметров структуры стали – концентрации углерода в твёрдом растворе феррита и объёмной доли частиц структурно-свободного цементита, выделяющегося по границам зёрен феррита в процессе длительной эксплуатации. Увеличение объёмной доли частиц карбидов приводит к уменьшению числа циклов  $N_0$  и  $N^*$ , а также к увеличению скорости роста трещины.

Проведённые исследования показали, что зависимость  $V_{тр}(\sigma)$  имеет близкий к экспоненциальному характер. Установлено, что угол наклона зависимости  $V_{тр}(\sigma)$  в полулогарифмических координатах зависит от химического и фазового состава стали, а также ее структурного состояния.

Для объяснения наблюдаемых зависимостей предложена физическая модель зарождения трещины. На основе разработанной модели проведён анализ влияния структурных факторов (объёмной доли и размера частиц карбидов) на параметр  $N_0$ . Результаты расчётов сопоставлены с экспериментальными данными.

*Работы выполнены в рамках программы «УМНИК» и при поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 г.г.*

**ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩИХ ДОБАВОК  
НА СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
ВЫСОКО ПРОЧНЫХ МАГНИТНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Fe-Cr-Co**

*Вершинин А.В.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Kleinerman@imp.uran.ru

Сплавы на основе системы Fe – Cr – Co являются магнито-твёрдыми материалами, которые могут быть использованы в производстве дисковых роторов высокоскоростных гистерезисных двигателей. Для реализации этих возможностей применялись различные методы улучшения их механических свойств, такие как легирование и различные режимы термообработок. Довольно успешными, с точки зрения пластичности и прочности, оказываются сплавы с добавками W и Ga после закалки, прокатки и отжига. Мессбауэровские исследования были выполнены на сплавах Fe – 22wt%, Cr – 15wt%, Co – 9wt%, W с добавкой 1 – 3wt%Ga или без него. Было показано влияние W и Ga на процесс формирования структуры, соответствующей повышенным механическим характеристикам. В представленной работе исследовались несколько сплавов, содержащих малые концентрации пластифицирующих элементов, таких как Ga, Cu и Al ( $\approx 0.5\text{wt}\%$ ), а также сплав в котором W был заменён на Mo. Мессбауэровские спектры были получены в модели постоянного ускорения с источником  $^{57}\text{Co}$  в матрице хрома при 300 К. Спектры были обработаны с использованием пакета программ MTOOLS. Учитывая полученные данные об изомерном сдвиге и квадрупольном расщеплении в бинарных Fe – W и Fe – Ga сплавах, было сделано предположение о различных корреляционных зависимостях изомерного сдвига и сверхтонкого поля и были выполнены тройные распределения вероятности распределения сверхтонкого поля  $P(H)$  и квадрупольного расщепления  $P(Q)$ . Также был выполнен структурный анализ с использованием метода рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии.

Проведён анализ полученных данных о составах, объёмных долях и морфологии наноразмерных структурных составляющих.

*Работа поддержана грантом РФФИ, № 10-08-00423-а.*

1. Самохвалов И.Г., Карповский А.Б., Квантовые жидкости, **100**, 25 (2000)
2. Вонсовский С.В., Магнетизм, Наука (1971)

**ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ НАБЛЮДЕНИЕ  
ВЫТЯГИВАНИЯ ДИСЛОКАЦИИ ВДОЛЬ ВЫДЕЛЕННОГО НАПРАВЛЕНИЯ  
В ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ Ni<sub>3</sub>Ge**

*Власова А.М.<sup>1\*</sup>, Гринберг Б.А.<sup>1</sup>, Иванов М.А.<sup>2</sup>, Антонова О.В.<sup>1</sup>, Плотников А.В.<sup>1</sup>, Кругликов Н.А.<sup>1</sup>,  
Соловьёва Ю.В.<sup>3</sup>*

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

<sup>2</sup>Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины, г. Киев, Украина

<sup>3</sup>Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия

\*E-mail: alisa@imp.uran.ru

Для материалов, проявляющих аномальный ход температурной зависимости предела текучести, характерна автоблокировка дислокаций, то есть их вытягивание вдоль выделенных направлений после нагрева без нагрузки [1]. В случае Ni<sub>3</sub>Ge (интерметаллид, сверхструктура типа L1<sub>2</sub>) этим направлением является  $\langle 110 \rangle$ , а именно направление пересечения плоскостей куба  $\{001\}$  и октаэдра  $\{111\}$ . Электронно-микроскопическое исследование показало, что результатом вытягивания дислокаций вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  являются перегибы разного вида: перегиб типа вытянутый сегмент-изогнутый сегмент, перегиб типа вытянутый-изогнутый-вытянутый сегменты, перегиб типа вытянутый-изогнутый под прямым углом сегменты.

Переход от вытянутого сегмента к изогнутому происходит, когда достигнут предельный угол автоблокировки  $\tilde{\varphi}$ .

Переход от прямолинейного сегмента к изогнутому, а затем вновь к прямолинейному обусловлен исходной формой петли.

Переход от вытянутого сегмента к изогнутому под прямым углом (смена винтового сегмента на краевой) наблюдается в том случае, когда отклонение от выделенного направления не успевает достичь  $\tilde{\varphi}$ , а угол  $\varphi$  изменяется скачком так, что  $\varphi > \tilde{\varphi}$  и вытягивание становится невозможным.

Криволинейные сегменты до нагрева могут иметь выпуклую и выпукло-вогнутую формы, сколько на петле будет чередований выпуклый-вогнутый, столько при вытягивании возможно переходов прямолинейный-криволинейный.

Ранее высказанное предположение о том, что вблизи выделенного направления можно ожидать образования не одного перегиба, а цепочки асимметричных перегибов подтверждено экспериментально. Цепочку асимметричных перегибов можно рассматривать, как зародыш, который имеет возможность превратиться в вытянутый вдоль выделенного направления сегмент и кратный перегиб. Суммарные длины прямолинейных сегментов и боковых перегибов не меняются, стимулом для перестройки является уменьшение числа изломов [2].

1. Гринберг Б.А., Иванов М.А., Некоторые особенности образования и разрушения дислокационных барьеров в интерметаллидах. V. Дислокационные превращения и автоблокировка дислокаций в интерметаллидах, ФММ, **105** №6, 587-597 (2008)
2. Гринберг Б.А., Иванов М.А., Плотников А.В., Реконструкция потенциального рельефа дислокации с помощью эффекта автоблокировки, Кристаллография **6**, (в печати) (2010)



**ВНУТРЕННЕЕ СТРОЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ  $Y_3Al_5O_{12}+Nd^{3+}$ ,  
ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ ЧОХРАЛЬСКОГО  
И НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ**

*Брызгалов А.Н., Волков П.В.\**

Челябинский государственный педагогический университет, г. Челябинск, Россия

\*E-mail: peter-007@mail.ru

Основой любого лазера является активный элемент, преобразующий энергию внешнего источника питания в нужное излучение. Таким элементом может являться кристалл алюмоиттриевого граната  $Y_3Al_5O_{12}$  (АИГ) с примесью трёхвалентного иона неодима  $Nd^{3+}$ . Оптические свойства данных кристаллов зависят от концентрации и распределения примеси  $Nd^{3+}$ . Целью нашей работы являлось исследование распределения и определение оптимальной концентрации  $Nd^{3+}$  в кристалле  $Y_3Al_5O_{12}$ , а также выявление наиболее приемлемого метода выращивания данных кристаллов с точки зрения их дефектности.

Для изучения структуры образцов использовался метод гидротермального травления и электронной микроскопии. У кристаллов АИГ, полученных методом Чохральского распределение  $Nd^{3+}$  происходит послойно по границам секторов роста в центральной области и параллельно боковой области в периферии [1].

В кристаллах, полученных методом направленной кристаллизации, примесь  $Nd^{3+}$  распределяется по границам ячеек. Секторы роста овальной формы наблюдаются в периферийных областях. У кристаллов с концентрацией примеси  $\sim 0.51$  ат.% выявляется мелкочаистое строение. С увеличением концентрации примеси возрастает плотность ячеек, а внутри них образуются бороздки, связанные с упругими напряжениями на периферийных участках. Дальнейшее увеличение примеси сопровождается образованием пластинчатых выделений второй фазы  $YAlO_3$ , связанное с избытком  $Nd^{3+}$ , а в области, закристаллизовавшейся в период инерциального роста, выявляются сферические образования с мозаичной структурой [2].

Для определения концентрации примеси  $Nd^{3+}$  в кристаллах использовался метод абсорбционной спектрофотометрии [3] в сравнении с данными по магнитной восприимчивости кристаллов, полученными методом Фарадея [4]. Более высокое значение концентрации неодима  $Nd^{3+}$  в кристаллах АИГ, полученное методом Фарадея по сравнению с методом спектрофотометрии, объясняется большей селективностью второго метода и возможным примесным вкладом в магнитную восприимчивость.

По результатам исследований было показано, что у кристаллов, полученных методом Чохральского, оптимальная концентрация примеси неодима  $Nd^{3+}$  составляет 0.8–0.9 ат.%, а у кристаллов, выращенных методом направленной кристаллизации, – 0.6 ат.%. Таким образом, с учётом данных электронной микроскопии кристаллы, полученные методом Чохральского, вследствие более равномерного распределения и более высокой концентрации активирующей примеси  $Nd^{3+}$  являются более перспективными для использования в качестве оптического материала для лазерного излучения [5].

1. Мильвидский М.Г., Кристаллография, **6**, 803 (1961)
2. Брызгалов А.Н., Эмирбеков Э.Т., Аксеновских А.Я., Письменный В.А., Сб. физика кристаллизации, 65-70 (1990)
3. Мейльман М.Л., Коломийцев А.И., Володина И.С. и др., Прикладная спектроскопия, **38**, 5, 755-759 (1982)
4. Вонсовский С.В., Магнетизм микрочастиц, Наука (1973)
5. Зверев Г.М., Гуляев Ю.Д., Шалаев Е.А., Шокин А.А., Лазеры на алюмоиттриевом гранате с неодимом, Радио и связь (1985)

**СИММЕТРИЙНЫЕ ОСОБЕННОСТИ  
КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ТИТАНИЛ-ФОСФАТА КАЛИЯ**

*Гажулина А.П.\*, Марычев М.О.*

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия

\*E-mail: asyagazhulina@yandex.ru

Фундаментальной задачей физики конденсированного состояния, в частности, физической кристаллографии, является установление взаимосвязей между структурой твёрдого тела и его свойствами. Симметрия структуры в целом несёт только часть информации о симметричных особенностях кристалла. Более полной характеристикой симметрии кристаллического пространства является псевдосимметрия, т.е. инвариантность части атомной структуры кристалла относительно некоторой надгруппы группы симметрии кристалла. Для количественной оценки степени инвариантности структуры относительно некоторой операции симметрии  $\hat{g}$  удобно использовать функционал [1]:

$$\eta_g [\rho(\vec{r})] = \frac{\int_V \rho(\vec{r}) \rho(\hat{g}\vec{r}) dV}{\int_V \rho^2(\vec{r}) dV}, \quad (1)$$

Семейство кристаллов со структурой типа КТР (титанил-фосфата калия) насчитывает более 100 соединений. Общая формула таких соединений может быть представлена в виде  $MM'OXO_4$ , где  $M = K, Rb, Na, Cs, Tl, NH_4$ ;  $M' = Ti, Sn, Sb, Zr, Ge, Al, Cr, Fe, V, Nb, Ta, Ga$ ;  $X = P, As, Si, Ge$  [2]. Кристаллы семейства КТР представляют большой интерес для исследований. Особенностью этих кристаллов является сочетание высокого значения квадратичной нелинейной восприимчивости, стойкости к воздействию интенсивного лазерного излучения, низкого оптического поглощения в видимой и ближней ИК области спектра, а также они удобны для практического применения с точки зрения комплекса их механических свойств.

В ходе данной работы систематизирована информация о структурных данных и данных по нелинейно-оптическим свойствам кристаллов семейства КТР, проведён расчёт псевдосимметрии [3] относительно операции инверсии для 115 кристаллов исследуемого семейства. Получены пространственные карты распределения степени инвариантности структур этих кристаллов относительно операции инверсии для различных положений точек инверсии в пределах их элементарных ячеек. Определены положения центров псевдоинверсии, соответствующие максимальным значениям степени инвариантности структур этих кристаллов относительно операции инверсии, проведён анализ их расположения относительно элементов симметрии пространственных групп симметрии исследованных кристаллов.

Получены гистограммы распределения величины степени псевдоинверсии по чистым кристаллам семейства КТР и по легированным кристаллам семейства КТР. Полученные расчётные значения сопоставлены с известными нелинейно-оптическими характеристиками рассмотренных кристаллов семейства КТР. Установлено, что кристаллы со значительными нелинейно-оптическими характеристиками обладают степенью псевдоинверсии, меньшей 0.5.

1. Chuprunov E.V., Crystallography Reports, **52**, 1 (2007)
2. Stucky G.D., Phillips M.L.F., Gier T.E., Chem. Mater., **1**, 492 (1989)
3. Программа «Псевдосимметрия» (С) 2006г. Сомов Н.В. Кафедра кристаллографии и экспериментальной физики физического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского

**СТРУКТУРА И СВОЙСТВА  
АТОМНО-УПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ СПЛАВОВ  $\text{Cu}_3\text{Pd}$  И  $\text{Cu}_3\text{Au}$   
ПОСЛЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЕМ И ОТЖИГОВ**

*Гохфельд Н.В.\**, Буйнова Л.Н., Пушин В.Г.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: gokhfeld@imp.uran.ru

Данная работа посвящена изучению структуры и свойств атомно-упорядочивающихся сплавов  $\text{Cu}_3\text{Pd}$  и  $\text{Cu}_3\text{Au}$  после интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК) и отжигов в субмикро- и нанокристаллическом состоянии, обеспечивающем одновременно высокие механические и электрические свойства. Эти сплавы перспективны для использования в качестве электрорезистивных контактных материалов.

Исследование микроструктур и атомноупорядоченных сплавов  $\text{Cu}_3\text{Pd}$  и  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , подвергнутых различным режимам ИПДК под давлением (6-9 ГПа) и последующим отжигам, проводили методами просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии. Измеряли также электросопротивление и микротвердость. Как известно, в упорядоченном состоянии сплав имеет наилучшие электрические свойства, а измельчение зерна позволит получить высокие прочностные свойства.

Изучение исходного состояния образцов сплавов после рекристаллизационного отжига и упорядочения с помощью сканирующей электронной микроскопии позволило установить, что разброс зерен по размерам составил от 40 до 100 нм. Методами просвечивающей электронной микроскопии было показано наличие в теле зерна сплавов дефектов в виде антифазных доменных границ (АФГ), разделяющих так называемые термические домены. Сплав  $\text{Cu}_3\text{Pd}$  имеет, кроме того, слоистую длиннопериодную сверхструктуру.

Проведенные в работе исследования показали следующее:

1. Обнаружен эффект атомного разупорядочения при ИПДК в  $\text{Cu} - \text{Pd}$ , а также эффект ускорения кинетики атомного упорядочения при отжиге (время полного атомного упорядочения из исходного разупорядоченного состояния сократилось более чем в 1000 раз) в условиях сохранения наномасштаба зерен в сплавах [1].
2. В сплавах  $\text{Cu}_3\text{Au} + 4\text{Ag}$  и в промышленном сплаве 585 пробы наблюдался эффект торможения роста атомноупорядоченных нанозерен при отжиге за счет барьерного действия дисперсных выделений на основе серебра. При этом твердость сплавов возросла в 1,5 раза по сравнению с обычным поликристаллическим состоянием.
3. Использование ИПДК и последующего отжига позволило впервые получить наноструктурные атомноупорядоченные сплавы на основе  $\text{Cu} - \text{Pd}$  и  $\text{Cu} - \text{Au}$ .
4. Выявлены существенные изменения доменной микроструктуры сплавов вследствие изменения механизма и кинетики атомного упорядочения. Так, обнаружено, что в наносплавах  $\text{Cu}_3\text{Pd}$  периодическая структура антифазных доменов является столбчатой (взамен слоистой в исходном состоянии).
5. Показано, что способ механотермической обработки, сочетающий интенсивную многопроходную пластическую деформацию и отжиг, может быть эффективно использован для получения высокопрочных наноструктурных резистивных и электроконтактных материалов на основе атомноупорядоченных сплавов.

1. Пушин В.Г., Пилюгин В.П., Буйнова Л.Н., Коуров Н.И., Тетерина Т.М., Ширинкина И.Г., Нанотехнология и физика функциональных нанокристаллических материалов, 2, 192 (2005)

## ДИЛАТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ОБРАТНОГО МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В СТАЛИ 12Х18Н10Т, ДЕФОРМИРОВАННОЙ ПРИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Максимкин О.П.<sup>1</sup>, Демидова Д.А.<sup>2\*</sup>, Рубан С.В.<sup>1</sup>, Гусев М.Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт Ядерной Физики, г. Алмата, Казахстан

<sup>2</sup>Евразийский Национальный Университет им. Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан

\*E-mail: demidovadarianp@gmail.com

Известно, что обратное  $\alpha \rightarrow \gamma$  превращение сопровождается рядом явлений, в результате чего существенным образом изменяются структура и физико-механические свойства аустенитных нержавеющей сталей.

Принимая во внимание, что эти стали являются основными конструкционными материалами для реакторов на быстрых нейтронах и часто применяются в состоянии механико-термической обработки (15–20% ХД + отжиг 800 °С, 1 час), исследования бездиффузионных фазовых превращений представляют определённый научный интерес.

В настоящей работе приведены и обсуждаются результаты экспериментов по отжигу холоднодеформированной стали 12Х18Н10Т.

Эксперименты по растяжению предварительно аустенизированных (1050 °С, 30 мин) стальных образцов с постоянной скоростью (0.5 мм/мин) проводили при различных отрицательных температурах (–20, –40, –60 °С) в камере, разработанной на базе универсальной испытательной машины Инстрон 1195, до определённых степеней деформации. Количество  $\alpha$ -фазы, индуцированной холодной деформацией и ее распределение по рабочей длине образца определяли с помощью феррозонда Fezitscore МР30. Деформированные стальные образцы, содержащие различное количество  $\alpha$ -фазы, нагревали до  $T = 800$  °С в ячейке дилатометра DIL 402 CD с постоянной скоростью нагрева 5 К/мин. Непрерывно регистрировали изменение длины нагреваемого образца и записывали экспериментальную кривую в координатах  $dL/L \approx f(T)$ .

В результате установлено, что независимо от первоначальной величины магнитной  $\alpha$ -фазы ее количество схожим образом уменьшается в интервале температур 400–800 °С. Показано, что процесс уменьшения ферромагнитной фазы при отжиге является многостадийным процессом и выделено 3 стадии, характеризующихся различной скоростью отжига; определены температурные интервалы стадий и значений температурных максимумов.

Полученные данные сопоставляются с результатами по изучению обратного мартенситного  $\alpha \rightarrow \gamma$  перехода в этой же стали, облучённой нейтронами в реакторе ВВР-К.

## ПРИЧИНЫ ВЫСОКОЙ УПРУГОСТИ ОДНОВРЕМЕННО С ПЛАСТИЧНОСТЬЮ В ЧЕЛОВЕЧЕСКОМ ДЕНТИНЕ

Зайцев Д.В.<sup>1\*</sup>, Бузова Е.В.<sup>2</sup>, Панфилов П.Е.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский Государственный Университет, г. Екатеринбург, Россия  
<sup>2</sup>Уральская Государственная Медицинская Академия, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Dmitry.Zaitsev@usu.ru

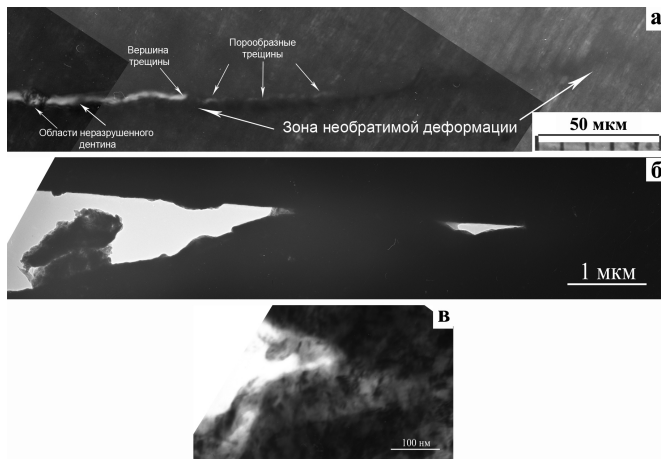


Рис. 1. Вершины трещин в дентине: а — оптическая микроскопия в режиме на просвет; б — просвечивающая электронная микроскопия, увеличение  $\times 7000$ ; в — просвечивающая электронная микроскопия, увеличение  $\times 100000$ .

возникающая в процессе удержания нагрузки, в зависимости от величины приложенной нагрузки, монотонно возрастает до предела пропорциональности ( $\sigma_{\text{пц}} = 348 \pm 16$  МПа), после чего происходит ее резкое увеличение. Такое поведение дентина позволяет сказать, что в области предела пропорциональности, происходит упруго-пластичный переход. Трещины, возникающие при испытании, обладали неострой вершиной, перед которой располагалась узкая полоса, по контрасту отличающаяся от окружающего материала, содержащая порообразные/сателлитные трещины (рис. 1а). Исследование вершины трещины с помощью просвечивающего электронного микроскопа, при малых ( $\times 7000$ ) (рис. 1б) и больших ( $\times 100000$ ) увеличениях, подтвердило результаты, полученные на оптическом микроскопе, но у вершины трещины наблюдается утонение материала. Такая картина роста трещины характерна пластичным металлам. Поведение дентина не характерно для волокнистых композитов, но может быть объяснено содержанием в дентинной матрице наноразмерных зёрен апатита ( $20 \div 50$ ).

*Исследования частично поддержаны Министерством Образования и Науки РФ (№ 2.2.2.2/5579) и АФГИР (США) (№ RUXO-005-EK-06/ BG7305 & BG9305).*

В работе было изучено механическое поведение человеческого дентина. Испытание на одноосное сжатие показало, что дентин является одновременно высоко-упругим  $\epsilon_{\text{пц}} = 15.3 \pm 1.3\%$  и прочным материалом  $\sigma_{\text{в}} = 538 \pm 19$  МПа, причём величина полной деформации,  $\epsilon = 23.5 \pm 1.2\%$ . Изучение зависимости механических свойств дентинной матрицы от угла между направлением сжатия и осью дентинного канала, основного структурного элемента дентина на микро-уровне, не выявило какой-либо зависимости. При исследовании дентина на сопротивляемость постоянным нагрузкам, было получено, что он способен в течение 5 часов выдерживать нагрузки, без разрушения, вплоть до предела прочности. Деформация,

## МОРФОЛОГИЯ Nb ВОЛОКОН И ДИФФУЗИОННЫХ СЛОЁВ Nb<sub>3</sub>Sn В МНОГОВОЛОКОННЫХ КОМПОЗИТАХ Nb/Cu-Sn, ЛЕГИРОВАННЫХ ТИТАНОМ

Попова Е.Н.<sup>1</sup>, Дерягина И.Л.<sup>1</sup>, Захаревская Е.Г.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов РАН, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Уральский государственный Университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: popova@imp.uran.ru

Многоволоконные сверхпроводящие композиты на основе соединения Nb<sub>3</sub>Sn разрабатываются во ВНИИ Неорганических материалов им. ак. Бочвара для практического применения, в частности, в ИТЭР (Интернациональном Термоядерном Экспериментальном Реакторе) [1]. Для повышения эксплуатационных характеристик проводников необходимы их структурные исследования, которые много лет проводятся в лаборатории прецизионных сплавов и интерметаллидов ИФМ УрО РАН [2].

В настоящей работе исследовались многоволоконные проводники Nb/Cu–Sn, изготовленные, так называемым, «бронзовым методом», при котором волокна ниобия вводят в матрицу из сплава Cu–Sn, а затем в результате многоступенчатой термомеханической обработки получают композит в виде проволоки диаметром 0.4–1.0 мм. [3]. На заключительном этапе композит подвергают диффузионному отжигу, в процессе которого олово из бронзы диффундирует в ниобиевые волокна, образуя сверхпроводящие слои Nb<sub>3</sub>Sn, обладающие нанокристаллической структурой. Размеры зёрен в слое играют определяющую роль в получении высоких сверхпроводящих характеристик, поскольку являются основными центрами закрепления линий магнитного потока (центрами пиннинга) в таких материалах [4]. Для оптимизации структуры и свойств этих сверхпроводников изменяют геометрию композитов, применяют легирование, подбирают режимы диффузионного отжига.

В работе методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии с построением гистограмм распределения зёрен Nb<sub>3</sub>Sn по размерам (с использованием программы SIAMS600) исследованы композиты со спаренными ниобиевыми волокнами, легированные титаном, который вводили или в бронзовую матрицу, или в волокна, применяя в последнем случае искусственное легирование [5].

На основании проведённых исследований показано, что при легировании бронзовой матрицы титаном происходит более глубокая и полная проработка ниобиевых волокон (формирование фазы Nb<sub>3</sub>Sn) по сравнению с искусственным легированием волокон. В композитах с легированной бронзовой матрицей количество остаточного ниобия после двойного диффузионного отжига меньше, а сверхпроводящие слои более дисперсны, в результате чего критическая плотность тока таких композитов выше. При легировании ниобиевых волокон концентрацию Ti следует ограничивать, т.к. при слишком высоком его содержании (1.5–1.7 мас. % в волокнах) в диффузионных слоях образуются интерметаллиды титана с оловом. При этом границы зёрен растущего слоя Nb<sub>3</sub>Sn очищаются, становятся более подвижными, и происходит увеличение размеров зёрен и разброса по размерам, что снижает токонесущую способность композита.

1. A. Shikov, V. Pantsyrny, A. Vorobieva et al. IEEE Trans. Appl. Supercond., **19**, 3, 1466-1469, (2009)
2. Романов Е.П., Сударева С.В., Попова Е.Н., Криницина Т.П., Низкотемпературные и высокотемпературные сверхпроводники и композиты на их основе, Екатеринбург: УрО РАН, 516 с. (2009)
3. Thoner M., Krauth H., Szulzyk A. et al. IEEE Trans. Magn., **27**, 2, 2027-2032, (1991)
4. Larbalestier D.C., Cryogenics, **35**, VAMAS Suppl., S15-S18, (1995)
5. Nikulin A., Shikov A., Vorobieva A. et al. Adv. Cryog. Eng. Mater., **42**, 1337-1343, (1996)

## К ВОПРОСУ О РАСПЛАВЛЕНИИ, ВИХРЕОБРАЗОВАНИИ И ФРАГМЕНТАЦИИ ПРИ СВАРКЕ ВЗРЫВОМ

*Иноземцев А.В.<sup>1\*</sup>, Гринберг Б.А.<sup>1</sup>, Иванов М.А.<sup>2</sup>, Рыбин В.В.<sup>3</sup>, Пацелов А.М.<sup>1</sup>, Елкина О.А.<sup>1</sup>,  
Антонова О.В.<sup>1</sup>*

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

<sup>2</sup>Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАНУ, г. Киев, Украина

<sup>3</sup>СЗО Академии инженерных наук им. А.М.Прохорова, г. С.-Петербург, Россия

\*E-mail: avinz@rambler.ru

Прочность сварного соединения в первую очередь зависит от структуры переходной зоны. Ранее в [1, 2] для волнообразной границы титан – алюминид титана выявлены следующие структурные элементы переходной зоны: поверхность раздела, неоднородности поверхности раздела, макрповороты, вихри, треки частиц, рекристаллизованная зона титана, полосы сдвига.

Далее развитие представлений [3] о переходной зоне продолжается в следующих направлениях: расплавление, вихреобразование, фрагментация. Исследована структура переходной зоны для границ раздела различных типов [4]. На границе раздела найдены структурные элементы, указывающие на расплавление тонкого слоя материала вдоль всей границы раздела, или частично.

Исследованы явления, происходящие вблизи границы раздела при сварке взрывом: расплавление, вихреобразование, фрагментация. Обнаружено, что для исследуемых соединений алюминид титана с титаном границы раздела оказались расплавленными, полностью или частично. При этом вследствие высокой прочности возникающего соединения расплавление в зоне контакта не является в определенных условиях критически опасным для сварки взрывом. Предложены варианты объяснения слоистой структуры локальных зон расплавления: вихреобразование или послойная кристаллизация. Обнаружены фрагменты (частицы) алюминид титана вблизи границы раздела. Одновременное наблюдение таких фрагментов и полосовой структуры свидетельствует о существовании двух различных процессов фрагментации.

Вне переходной зоны, где внешнее воздействие является менее сильным, фрагментация происходит традиционным путём: накачка дислокаций, последующие структурные превращения, полосовая структура. Фрагментация как разбиение (дробление) материала на слабо связанные микрообъёмы является процессом, альтернативным разрушению. Фрагментация такого типа реализуется в процессе сварки взрывом в приконтактных микрообъёмах материала и, как и разрушение, обеспечивают максимально возможную в определённых условиях диссипацию энергии. Можно полагать, что возникающие фрагменты одного материала достаточно легко и быстро могут проникать в другой материал. Эти же процессы фрагментации и трения должны приводить к выделению большого количества тепла, что и обуславливает появление областей расплава в промежуточной области вблизи границы раздела.

В результате можно говорить о двух различных процессах фрагментации, которые отличаются друг от друга, как по своей природе, так и по топологии. Для того чтобы различать два процесса фрагментации, можно ввести для традиционного процесса название – фрагментация с сильной связью, а для наблюдаемого в настоящей работе – фрагментация со слабой связью.

1. Рыбин В.В., Сидоров И.И. и др., Вопросы материаловедения, **59**, 3 (2009).
2. Рыбин В.В., Гринберг Б.А. и др., ФММ, **108**, 4 (2009)
3. Рыбин В.В., Гринберг Б.А., Иванов М.А. и др., Сварка и диагностика, 3 (2010)
4. Дерibas А.А., Физика упрочнения и сварки взрывом, Наука (1980)

## ЗЕРНОГРАНИЧНАЯ ДИФФУЗИЯ В НАНОСТРУКТУРНЫХ МАТЕРИАЛАХ ПРИ ОТНОСИТЕЛЬНО БОЛЬШИХ ВРЕМЕНАХ ОТЖИГА

*Кесарев А.Г.\**, *Кондратьев В.В.*, *Ломаев И.Л.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kesarev@bk.ru

Особенности диффузии в наноструктурных материалах [1], полученных интенсивной пластической деформацией, обычно связывают с неравновесным состоянием границ зёрен [2]. Ранее нами было показано [3], что вблизи такой границы, описываемой, например, в простой модели хаотически распределённых дислокаций, формируется область ускоренной диффузии, в которой её коэффициент  $D(x)$  имеет сильную координатную зависимость, резко убывая с ростом  $x$  (при удалении вглубь зерна). Используя эту модель, в работах [4, 5] были получены и проанализированы решения диффузионной задачи в полупространстве для произвольной координатной зависимости  $D(x)$  в широком диапазоне отжига. Следующий этап состоял в решении задачи зернограничной диффузии (ЗГД) в рамках модели Фишера [1] с учётом существования области ускоренной диффузии вблизи одиночной границы зерна, характеризуемой коэффициентом ЗГД  $D_g$  и диффузионной шириной  $\delta$ . Вначале эта задача решалась для случая малой глубины проникновения диффузанта [6]. В данной работе нами проанализирован случай относительно больших временах отжига, когда глубина проникновения диффузанта в зерно сопоставима с шириной области ускоренной диффузии, но меньше  $d/2$ , где  $d$  – размер зерна. В результате для средней слоевой концентрации была получена следующая зависимость от глубины проникновения в образец  $y$  и времени  $t$

$$\bar{C}(y, t) = C_0 \frac{3l(t)}{d} \operatorname{erfc} \left( \frac{y}{2l_{gr}} \right), \quad l_{gr} = \sqrt{\delta D_g \int_0^t \frac{d\tau}{l(\tau)}}. \quad (1)$$

Здесь  $l_{gr}$  – характерный масштаб (диффузионная длина), для обычных поликристаллов равный  $\sqrt{D_g t}$ ,  $l(t) = 2x_0(t) - \delta$  – эффективная ширина заполненной области (диффузионная ширина границы),  $x_0(t) = \delta/2 - \int_0^t \frac{dD}{dx} \Big|_{x_0(\tau)} d\tau$ ,  $C_0$  – концентрация на свободной границе образца. Проведённые численные расчёты позволили установить условия, при которых зависимость (1) выполняется с необходимой точностью.

Таким образом, при больших временах отжига координатная зависимость  $\bar{C}(y, t)$  по форме совпадает со случаем С-режима, но с зависящей от времени эффективной шириной границы  $l(t)$  и с эффективной глубиной проникновения  $l_{gr}$ , закон изменения которой со временем отличается от С-режима.

*Работа выполнена по плану РАН – шифр «Структура» № з.р. 01.02.006.13392*

1. Колобов Ю.Р., Валиев Р.З. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов. Новосибирск: Наука, (2001)
2. Валиев Р.З., Александров И.В. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. М.: Логос, (2000)
3. Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., ФММ, **104**, 5 (2007)
4. Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., ФММ, **106**, 341 (2008)
5. Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., ФММ, **108**, 33, (2009)
6. Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Ломаев И.Л., ФММ, **109**, 357 (2010)



**МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
СИЛЬНОДЕФОРМИРОВАННОГО МАГНИЯ**

*Кругликов Н.А.<sup>1\*</sup>, Каменецкий Б.И.<sup>1</sup>, Волков А.Ю.<sup>1</sup>, Савай Р.В.<sup>1</sup>*

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

<sup>2</sup>Институт машиноведения УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: nick@imp.uran.ru

Деформирование чистого магния в условиях всестороннего сжатия позволяет сильно изменить его микроструктуру и механические свойства. В свободном состоянии магний является достаточно хрупким материалом. Применяя метод деформирования в обойме, нам удалось достичь достаточно высоких степеней деформации (до 90%), и при этом получить массивные образцы пригодные для механических испытаний [1,2]. Настоящая работа направлена на изучение микроструктуры и деформационного поведения магния после интенсивной пластической деформации.

После сильной пластической деформации можно было наблюдать новые зёрна размером до десяти микрон, которые, вероятно, образовались в процессе деформирования. В новых зёрнах плотность дислокаций была сравнима с их плотностью в исходном состоянии. Судя по всему, при таком режиме деформирования имеет место динамическая рекристаллизация, которая и отвечает за сброс внутренних напряжений и пластификацию вещества. Сложным для интерпретации, является вопрос о моменте возникновения новых зёрен.

Можно ожидать, что статическая рекристаллизация возможна даже при комнатной температуре. Тогда не ясно, какой тип рекристаллизации (статическая или динамическая) обеспечивает формирование новых зёрен к моменту наблюдения. Для разделения этих эффектов был проведён ряд экспериментов по деформированию при низких температурах и последующему «вылёживанию» при комнатной температуре. Электронно-микроскопическое исследование показало, что в образцах, подвергнутых длительной выдержке при комнатной температуре (несколько суток) значительная доля объёма состоит из новых зёрен с малой плотностью дефектов. В то же время, в образцах, где выдержка составляла менее суток, свободные от дефектов зёрна не наблюдались, но присутствовали зёрна с большим количеством дефектов. Кроме того, для определения влияния сильной деформации на изменение деформационных характеристик магния были проведены испытания на сжатие с записью деформационных кривых. Таким образом, в результате проведённого исследования:

1. Исследована микроструктура магния в различных структурных состояниях после осадки в обоймах и дополнительных выдержках при комнатной температуре. Причем, показано, что при сильных деформациях имеет место динамическая рекристаллизация, а при дополнительных выдержках возможна статическая рекристаллизация.
2. Изучены механические свойства магния после осадки в обоймах.

*Работа выполнена при поддержке проекта №10 программы президиума РАН, гранта №4-М УрО РАН и Фонда содействия отечественной науке. Электронно-микроскопические исследования выполнены в ЦКП ИФМ УрО РАН.*

1. Кругликов Н.А., Каменецкий Б.И., Волков А.Ю., Ширинкина И.Г., Еремина О.В., Кадочников И.А., Астафьев В.В., Тезисы докладов Юбилейной X всероссийской молодежной школы-семинара СПФКС-10, 9-15 ноября 2009, 166 (2009)
2. Кругликов Н.А., Каменецкий Б.И., Власова А.М., Волков А.Ю., Сборник материалов XIX Петербургских чтений по проблемам прочности, 13-15 апреля 2010, 226 (2010)

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ЛОКАЛИЗАЦИИ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ ОБРАЗЦОВ ИЗ СПЛАВА А6061

*Ляпунова Е.А.\**, Сокоиков М.А., Чудинов В.В., Уваров С.В., Наймарк О.Б.

Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Россия

\*E-mail: lyapunova@icmm.ru

Вопросы высокоскоростной деформации металлов неизменно привлекают большой интерес исследователей ввиду как теоретической, так и прикладной значимости [1,2]. Однако сложность протекающих при такой деформации процессов обуславливает необходимость комплексного рассмотрения механических, структурных и других свойств для корректного описания поведения металла в условиях динамического нагружения. Данная работа направлена на выявление закономерностей локализации пластической деформации в образцах из сплава А6061 при образовании «пробки».

Была проведена серия экспериментов по деформированию цилиндрических образцов-мишеней стальным ударником, разгоняемым до скоростей, варьирующихся в диапазоне от 101 до 260 м/с. При малых скоростях соударения, недостаточных для полного выноса пробки из образца, механизмом разрушения является образование и слияние микропор под действием сдвиговых напряжений. С возрастанием скорости соударения разрушение происходит по узким полосам локализованной деформации. В переходной зоне, ширина которой зависит как от скорости соударения, так и от расстояния до нагружаемой поверхности, активизируются различные механизмы деформирования, обусловленные особенностями внутренней структуры. Микроскопический анализ внутренней структуры переходной области деформированного материала вблизи поверхности разрушения позволил оценить величины локальных сдвиговых деформаций в зависимости от расстояния до места локализации деформации в различных по глубине образца областях. Проведено исследование глубины проникания ударника от скорости соударения. Теоретические расчёты процессов высокоскоростной пластической деформации, основанные на структурно-кинетической модели [3], совпадают с полученными экспериментальными данными [4].

1. Зукас Дж., Николас Т., Свифт Х.Ф. и др., Динамика удара, М.: Мир, 296 (1985)
2. Nesterenko V.F., Meyers M.A., Wright T.W., Metallurgical and materials applications of shock-wave and high-strain-rate phenomena, 47, 397–404
3. Наймарк О.Б., Физическая мезомеханика, 6, 45–72 (2004)
4. Сокоиков М.А., Деформация и разрушение материалов, 7, 13–17 (2005)

**РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ, СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ  
В СПЛАВАХ Fe-Ni-Al С РАЗЛИЧНОЙ МИКРОСТРУКТУРОЙ***Ляшков К.А.\* , Данилов С.Е.*<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: prankster@uralweb.ru

Сплавы системы Fe – Ni являются основой для многих конструкционных материалов. В том числе существует ряд ценных в практическом плане инварных сплавов с концентрацией никеля на уровне 30 – 50%. Вопросы стабильности этих сплавов при различных воздействиях и условия деградации инварности являются важными с практической и с научной точки зрения, поскольку эти процессы до конца не ясны.

Целью данной работы является изучение влияния легирования Al на структурно-фазовые превращения при облучении в сплавах на основе Fe – Ni с различной микроструктурой.

Исследовались сплавы Fe–34.7ат.%Ni (Fe-Ni) и Fe–31ат.%Ni–11ат.%Al (Fe-Ni-Al) приготовленные вакуумным переплавом. После прокатки, резки и электрополировки, образцы отжигали в вакууме  $10^{-6}$  мм.рт.ст. при 1373 К 1 час и закачивали со скоростью около 1000 К/сек. Рентгено-структурный анализ показал наличие одной аустенитной фазы в обоих сплавах. Образцы имели размер зерна ~ 50 мкм и плотность дислокаций порядка  $10^7$  см<sup>-2</sup>.

Сплав Fe – Ni – Al в исследовании использовался в состоянии, закалённом от 1373 К (НА-3). Кроме того, из этого сплава пластической деформацией при комнатной температуре ( $\epsilon = 40\%$ ) был получен сплав с высокой концентрацией дислокационных стоков и вакансионных кластеров (НА-Д).

Облучения 5 МэВ электронами при различных температурах и изохронные отжиги со средней скоростью нагрева 1 К/мин были проведены в атмосфере чистого проточного гелия. В качестве метода исследования было использовано измерение остаточного электросопротивления, чувствительного к процессам атомного перераспределения в твёрдом растворе. Остаточное электросопротивление измеряли стандартным четырёхзондовым потенциометрическим методом с чувствительностью на уровне 0.01 нОм·см и точностью не хуже 0.05%.

В ходе исследования было установлено, что при облучении в сплаве Fe – Ni происходит расслоение твёрдого раствора, причём степень расслоения существенно превышает то расслоение, которое может быть достигнуто при термической обработке. При температурах 350 – 500 К в процессе отжига происходит диссоциация вакансионных кластеров, обеспечивающая дальнейшее расслоение за счёт свободной миграции вакансий, образующихся при диссоциации.

В сплаве Fe – Ni – Al наблюдается распад твёрдого раствора с образованием  $\gamma'$ -фазы. Изменение электросопротивления, связанное с этим процессом, имеет две фазы: рост электросопротивления на начальных этапах распада твёрдого раствора (предвыделения) и спад электросопротивления при дальнейшем росте размеров выделений. Предположительно это связано с потерей когерентности решёток выделений и матрицы.

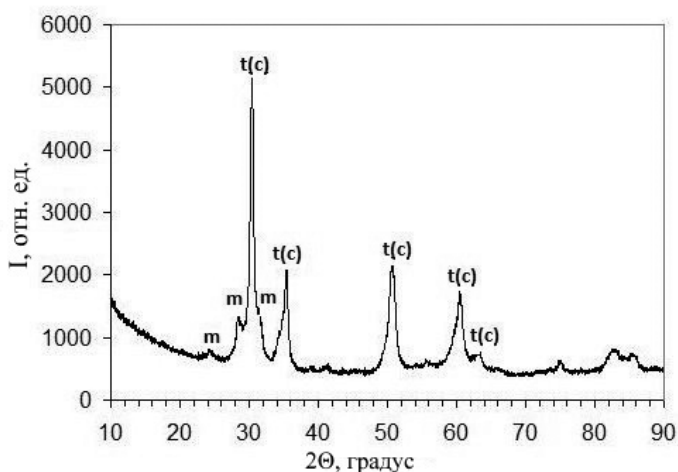
Облучение сплава Fe – Ni – Al электронами при различных температурах приводит к ускорению процесса распада твёрдого раствора. При этом также образуются вакансионные кластеры, но более мелкие, чем в сплаве Fe – Ni. Их диссоциация происходит при тех же температурах, что и в сплаве Fe – Ni и приводит к дальнейшему распаду твёрдого раствора.

Дислокационная микроструктура, образованная деформацией, ослабляет процесс распада твёрдого раствора при облучении и последующем отжиге за счёт того, что она служит стоками для точечных дефектов и эффективно понижает их концентрацию. Диссоциация вакансионных кластеров, образованных деформацией, происходит при тех же температурах, что и вакансионных кластеров, образованных облучением.

**РЕНТГЕНОВСКИЙ ФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОРОШКА  $\text{HfO}_2$  С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ПОЛНОПРОФИЛЬНОГО АНАЛИЗА РИТВЕЛЬДА***Маканов С.В., Денисова О.В., Чукин А.В.*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия  
E-mail: mazzzik\_i@mail.ru

Изучение оксида гафния стимулировано возросшим в последнее время интересом к нему как к перспективному материалу для использования в ряде наукоёмких отраслей техники: атомной, ракетно-космической, электронной и т.д.

Оксид гафния получают из водных растворов гидроксида гафния с последующей термической дегидратацией. Причём, в зависимости от условий термообработки: скорости и времени нагрева, наличия примесей, ультразвуковых и механических воздействий, может образовываться оксид с различными физическими свойствами, зависящими от модификации его кристаллической решётки: моноклинной, тетрагональной, кубической. Таким образом, для дальнейшего практического использования полученного в конкретных условиях образца, необходимо надёжно определять его фазовый состав.

Рис. 1. Дифрактограмма исследуемого образца  $\text{HfO}_2$ 

Целью работы являлось исследование фазового состава образца оксида гафния, полученного на кафедре редких металлов физико-технического факультета УрФУ, путём термической дегидратации очищенного от примесей гидроксида гафния (прокаливания в течение 4 часов при температуре  $600\text{ }^\circ\text{C}$  в вакууме). Рентгеновский фазовый анализ этого порошкового образца был проведён с помощью рентгеновского дифрактометра X'PertPro с фокусировкой по Бреггу-Брентано на  $K_\alpha$ -излучении меди. Широкие дифракционные максимумы (Рис.1) свидетельствуют о малых, порядка нескольких нанометров, размерах зёрен, присутствующих в образце, и затрудняют проведение фазового анализа. Надёжно идентифицируется моноклинная фаза, второй из предполагаемых фаз может являться как кубическая, так и тетрагональная, отличающиеся лишь расщеплением некоторых пиков, которое маскируется физическим уширением линий.

Для надёжного установления фазового состава был применён метод полнопрофильного анализа Ритвельда [1-2]. В ходе этой итерационной процедуры варьировались параметры моделей структуры каждой фазы для достижения наилучшего совпадения расчётной и экспериментальной дифрактограмм. В результате применения данного метода удалось однозначно установить наличие в образце двух фаз — моноклинной и тетрагональной.

1. Ковба Л.М., Рентгенография в неорганической химии, МГУ (1991)
2. O'Connor B. H., Pratapa S., Advances in X-ray Analysis 2002, 45, 158-165, (2002)

**СТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ ОБЪЁМНЫХ КРИСТАЛЛОВ  
РАЗБАВЛЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ  $Zn_{1-x}Co_xS$  И  $Zn_{1-x}Co_xSe$  ( $x=0.01$ )**

*Максимов В.И.\*, Дубинин С.Ф., Пархоменко В.Д., Суркова Т.П.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kokailo@rambler.ru

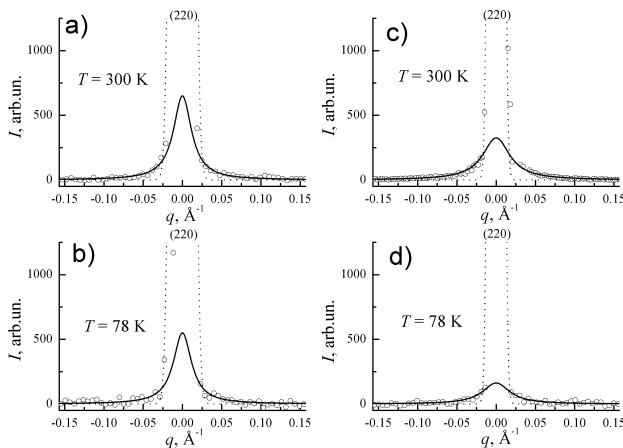


Рис. 1. Картины нейтронной дифракции кристалла  $Zn_{0.99}Co_{0.01}S$  (a, b) и  $Zn_{0.99}Co_{0.01}Se$  (c, d) вблизи брэгговских рефлексов (220) при температурах 300 К и 78 К. Точки – эксперимент, пунктиром показаны основания брэгговских рефлексов, сплошными кривыми указаны максимумы диффузного рассеяния.

рассеяния нейтронов в окрестности брэгговских отражений с температурой свидетельствует скорее о том, что с охлаждением образцов кристаллическая решётка ZnCh подавляет сформированные ионами  $Co^{2+}$  нанискажения. Все это качественно отличает результаты настоящей работы от данных [1]. Различия топологий структурного состояния в соединениях  $Zn_{1-x}Co_xCh$  и  $Zn_{1-x}M_xSe$  ( $M = Cr, Ni, V; x \propto 0.001$ ) [1], возможно, связаны с тем, что основное состояние  $Co^{2+}$  не имеет в тетраэдрическом поле орбитального вырождения [2], и ионы  $Co^{2+}$  в противоположность  $V^{2+}, Cr^{2+}, Ni^{2+}, Fe^{2+}$  не являются ян-теллеровскими.

*Работа выполнена по плану РАН (тема № 01.2.006 13394), при частичной поддержке ОУС УрО РАН (грант № 1-М), Минобрнауки РФ (контракт № 02.518.11.7119) и в рамках программ фундаментальных исследований: ОФН РАН «Нейтронные исследования структуры вещества и фундаментальных свойств материи», проект № 09-Т-2-1012 УрО РАН.*

1. Дубинин С.Ф. и др. ФТТ, **48**, 2151 (2006)
2. Дубинин С.Ф. и др. ФТТ, **49**, 1177 (2007).
3. Крупичка С., Физика ферритов и родственных им магнитных окислов. Т.1. Мир (1976).

**СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ЗАМЕЩЁННОГО ВАНАДИЕМ ХРОМАТА ВИСМУТА,  
СОДЕРЖАЩЕГО КОЛОНЧАТЫЕ СТРУКТУРЫ  $[\text{Bi}_{12}\text{O}_{14}]_n^{8n+}$**

*Михайловская З.А.<sup>1\*</sup>, Петрова С.А.<sup>2</sup>, Буянова Е.С.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Уральский Государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: zozoikina@mail.ru

В настоящее время активно изучаются сложные оксиды на основе  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ , которые проявляют такие практически значимые физико-химические свойства, как кислород-ионная проводимость, сегнетоэлектрические свойства и сверхпроводимость. Структуры висмутосодержащих сложных оксидов зачастую весьма сложны: структура многих фаз до сих пор не определена из-за невозможности получить монокристаллы из расплава и сложностью определения позиций кислорода из рентгенографических данных. В системе  $\text{Bi} - \text{M} - \text{O}$  ( $\text{M} = \text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}, \text{W}, \text{Mo}$ ) в соединениях с высоким содержанием висмута наблюдаются, в основном, флюоритоподобные структуры подрешётки висмута, порой несоразмерные или с присутствием надструктурных упорядочений.

В 1996 г. в системе  $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{MoO}_3 - \text{V}_2\text{O}_5$  у соединений с моноклинной симметрией  $\text{Bi}_{13}\text{Mo}_5\text{O}_{34.5}$  и  $\text{Bi}_{13}\text{Mo}_4\text{VO}_{34}$  был обнаружен уникальный тип структур, содержащий колончатые фрагменты  $[\text{Bi}_{12}\text{O}_{14}]_n^{8n+}$ , тетраэдры  $(\text{Mo}/\text{V})\text{O}_4$  и изолированные атомы  $\text{Bi}$ . Позднее были показаны возможные изотипные фазы:  $\text{Bi}_{13-x}\text{Me}_x\text{Mo}_5\text{O}_{34}$  ( $\text{Me} = \text{Pb}, \text{Te}$ )  $\text{Bi}_{13}\text{Mo}_{5-x}\text{Me}_x\text{O}_{34}$  ( $\text{Me} = \text{Cr}$ ). Данные соединения являются слоистыми кислород-ионными проводниками со средними значениями проводимости. Часть же системы  $\text{Bi} - \text{Cr} - \text{O}$  с высокими содержанием висмута до сих пор является мало исследованной. Соединение  $\text{Bi}_{12}\text{Cr}_4\text{VO}_{30}$  также содержит висмуткислородные колонки, и хромкислородные тетраэдры, однако не содержит изолированных атомов висмута, что приводит к увеличению симметрии до орторомбической и существенному снижению проводимости.

В данной работе в ходе изучения системы  $\text{Bi} - \text{Cr} - \text{O}$  получен и исследован замещённый ванадием хромат висмута со структурой изоморфной  $\text{Bi}_{13}\text{Mo}_4\text{VO}_{34}$ , образующий ряд твёрдых растворов с  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ . Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показано присутствие в соединении как  $\text{Cr}^{+6}$ , так и  $\text{Cr}^{+3}$ , что, вместе с данными по определению пикнометрической плотности, свидетельствует о частичном замещении хромом висмута.

Исследование порошка показали высокую слоистость частиц геометрические размеры которых лежат в пределах 10-50 нм. На поверхности частиц присутствует примесная фаза наноразмерного  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ , которая не обнаруживается посредством РФА из-за низкого массового содержания (<0.1%), и малых окр.

Произведённый высокотемпературный анализ образцов и импедансная спектроскопия показали отсутствие фазовых переходов в диапазоне 30-750 °С и линейное изменение параметров элементарной ячейки. Соединение проявляет среднюю кислород-ионную проводимость.

## ОБОБЩЁННЫЙ ЗАКОН РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ГРАФИТА И ЕГО СВЯЗЬ С ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ ЧУГУНА

*Мухаметшина И.Ю.\**, *Белых В.В.*

Ижевский государственный технический университет, г. Ижевск, Россия

\*E-mail: fizika@istu.ru

Металлографический анализ структуры графита в магниевом чугуна позволил выявить форму и распределение графитовых включений по размерным группам и связать параметры с физико-механическими свойствами чугуна [1]. Образованию пластинчатой, хлопьевидной или шаровидной форм графита предшествуют процессы самоорганизации структур с С – С связью, их объединение приводит к образованию графитовых включений (фрактальных кластеров).

Представляет интерес использование обобщенного закона изменения плотности распределения графитовых включений  $P(x)$  от размера включения  $x$  [2]

$$P(x) = \exp[-(\alpha x + \beta x^2)],$$

и обработка на её основе статистических кривых для расчёта структурных параметров графита  $\alpha$  и  $\beta$ , где:  $x = a/a_{max}$ ;  $a$  – диаметр равноосных или наибольшая длина вытянутых включений;  $a_{max}$  – максимальный размер включений; ( $0 < x \leq 1$ );  $u = \ln x$ .

С улучшением формы графита размеры включений  $a$  уменьшаются, вследствие мультифрактальности распределения наблюдается зависимость параметра  $\alpha$  от размера  $a$  и от формы включений ( $\alpha_{min} \leq \alpha \leq \alpha_{max}$ ). Для размерности фрактального кластера ( $D = 3 + \alpha$ ) получается оценка  $D_{min} \leq D \leq D_{max}$ .

С улучшением формы графита  $\beta$  возрастает от 0.3 у чугуна с пластинчатой формой до 1.0 у чугуна с шаровидной формой графита; удельное электросопротивление  $\rho$  уменьшается от  $(8.7 - 10.6) \cdot 10^{-7}$  Ом·м до  $(5.7 - 6.0) \cdot 10^{-7}$  Ом·м; термоэдс  $E$  увеличивается от 6.6 мкВ/К до 9.3 мкВ/К; прочность  $\sigma_B$  увеличивается с 23 МПа до 482 МПа; твердость НВ возрастает от 121 до 245; средний размер включений  $\bar{a}$  падает от (124 – 146) мкм до (47 – 51) мкм; среднее расстояние между включениями  $\bar{b}$  возрастает от (70 – 95) мкм до (146 – 313) мкм; индекс графита  $J_f$  снижается от 1.7 до 0.15.

1. Белых В.В., Ри Хосен, Марьян Б.Н., Физико-механические свойства железоуглеродистых сплавов. Методы контроля и прогнозирования качества отливок, Владивосток: Дальнаука, 312 с. (2003)
2. Штремель М.А., Заводская лаборатория. Диагностика материалов 8, 71, 25-31 (2005)

## АВТОБЛОКИРОВКА ДИСЛОКАЦИЙ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ $Ni_3Ge$ ПРИ КУБИЧЕСКОМ СКОЛЬЖЕНИИ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

Плотников А.В.<sup>1\*</sup>, Гринберг Б.А.<sup>1</sup>, Иванов М.А.<sup>2</sup>, Антонова О.В.<sup>1</sup>, Кругликов Н.А.<sup>1</sup>,  
Соловьёва Ю.В.<sup>3</sup>, Власова А.М.<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины, г. Киев, Украина

<sup>3</sup>Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия

\*E-mail: alexx\_2002@inbox.ru

В работе получены данные по автоблокировке дислокаций в интерметаллиде  $Ni_3Ge$  при кубическом скольжении. Эффект автоблокировки, заключающийся в превращении дислокаций при нулевом внешнем напряжении из скользящих конфигураций в заблокированные, был теоретически предсказан, а затем обнаружен в  $Ni_3(Al, Nb)$  [1, 2] и  $TiAl$ .

В настоящей работе использовались  $\langle 111 \rangle$  монокристаллы  $Ni_3Ge$ . Исходная дислокационная структура состояла из криволинейных дислокаций. Доказательством автоблокировки является вытягивание дислокаций вдоль соответствующих выделенных направлений и наблюдение прямолинейных сегментов после нагрева без нагрузки.

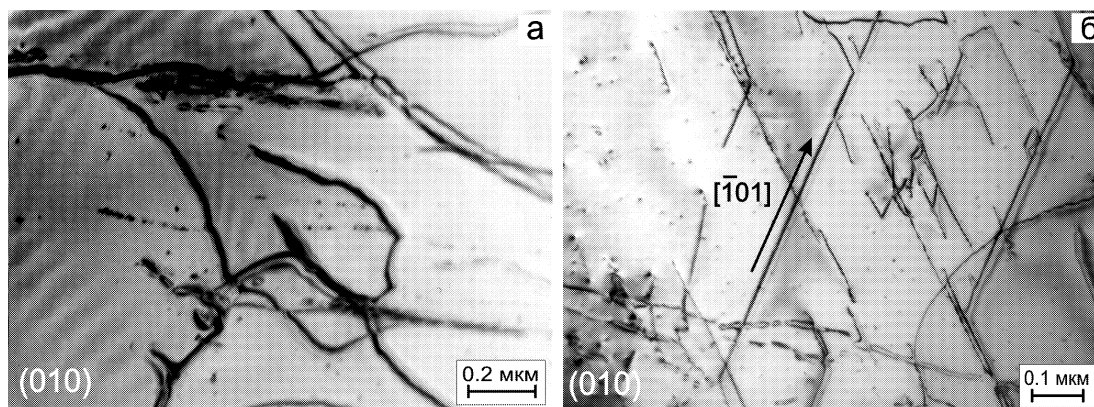


Рис. 1. Дислокационная структура  $Ni_3Ge$  после: а - деформации при  $400^\circ C$  с быстрым охлаждением; б - предварительная деформация и нагрев при  $100^\circ C$  в течении 10 мин.

На рис. 1 представлена дислокационная структура  $Ni_3Ge$  после предварительной деформации (рис. 1а) и последующего нагрева без нагрузки (рис. 1б). С помощью **gb**-анализа показано, что для исходных кубических систем скольжения заблокированными при последующем нагреве являются винтовые дислокации, принадлежащие кубическим системам скольжения с наибольшим фактором Шмида. Эффект автоблокировки был обнаружен также и при медленном охлаждении ( $\sim 1$  ч) деформированного при  $400^\circ C$  образца. Для сравнения подобные эксперименты были осуществлены для ОЦК металла (Mo). При этом автоблокировка дислокаций не была обнаружена.

На основе совокупности экспериментальных данных показано, что определяющую роль в блокировке и автоблокировке дислокаций играет многодолинный характер потенциального рельефа [3], так что эффект автоблокировки фактически представляет собой самопогружение дислокации в глубокую долину без помощи внешнего напряжения.

1. Гринберг Б.А., Антонова О.В., Иванов М.А., Пацелов А.М., Плотников А.В., ФММ, **102** №1, 77-83 (2006)
2. Пацелов А.М., Антонова О.В., Гринберг Б.А., Иванов М.А., Плотников А.В., ФММ, **104** №5, 534-540 (2007)
3. Гринберг Б.А., Иванов М.А., Плотников А.В., Кристаллография, **6** (в печати) (2010)



**ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ ФЕРРИТНО-ПЕРЛИТНОЙ СТАЛИ  
05Г2МФБ ПОСЛЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЕМ  
ПОД ДАВЛЕНИЕМ**

*Попова С.А.\* , Литовченко И.Ю.*

Томский государственный университет, г. Томск, Россия

\*E-mail: svetlanca@sibmail.com

Ферритно-перлитные стали в настоящее время используются в качестве материала для изготовления трубопроводов. Знание механизмов больших пластических деформаций ферритно-перлитных сталей, в том числе механизмов формирования СМК и НК структурных состояний, позволит целенаправленно улучшать прочностные свойства этих материалов при сохранении достаточного запаса пластичности.

Целью настоящей работы является изучение особенностей дефектной структуры и механизмов формирования СМК и НК структурных состояний в ферритно-бейнитной стали 05Г2МФБ в процессе больших пластических деформаций кручением под давлением.

В качестве материала для исследования была использована сталь 05Г2МФБ следующего состава (в мас. %): С—0.07%, Мп—1.65%, Si—0.29%, Nb—0.045%, V—0.08%, Мо—0.022%. Исходное состояние стали получено в результате высокотемпературной (900 °С—1000 °С) прокатки с последующим охлаждением на воздухе. Пластическую деформацию кручением под давлением (6 ГПа, 5 оборотов) осуществляли в наковальнях Бриджмена. Дефектную структуру исследовали методами оптической металлографии на микроскопе Olympus GX-71, рентгенструктурного фазового анализа на дифрактометре Shimadzu XRD – 6000, просвечивающей электронной микроскопии на микроскопе Philips CM-12.

Проведённые электронно-микроскопические исследования показали, что пластическая деформация кручением под давлением приводит к растворению крупных частиц цементита. После кручения под давлением наблюдаются только отдельные рефлексы цементита и  $\gamma$  – аустенита. Характерные размеры зёрен, оцениваемые по темнопольному изображению, позволяют отнести структурное состояние стали после ИПД кручением к субмикроструктурному. Проведённый темнопольный анализ при разных углах наклона в гониометре показал, что, внутри части зёрен наблюдаются структурные состояния с ненулевыми значениями компонент тензора кривизны кристаллической решётки. При этом оценки соответствующих компонент дают значения  $\chi_{ij} = 3-4$  °/мкм [1].

Таким образом, в процессе кручения под давлением в ферритно-перлитной стали 05Г2МФБ происходит эффективное уменьшение размера зерна феррита с формированием СМК и НК структурных состояний. В процессе пластической деформации происходит разрушение перлитной структуры. Основными механизмами формирования СМК и НК структурных состояний являются дислокационно-дисклинационные механизмы деформации. Действие этих механизмов приводит к формированию внутри отдельных зёрен нескомпенсированных дислокационных зарядов, состояний с кривизной кристаллической решётки и градиентами кривизны.

*Работа выполнена на оборудовании Томского материаловедческого центра коллективного пользования при ТГУ.*

1. Тюменцев А.Н., Коротаев А.Д., Пинжин Ю.П., Высокодефектные структурные состояния, поля локальных внутренних напряжений и кооперативные механизмы мезоуровня деформации и переориентации кристалла в наноструктурных металлических материалах, Физическая мезомеханика, 7, 4, 35-54 (2004)
2. Владимиров В.И., Романов А.Е., Дисклинации в кристаллах, Л.: Наука, 224 (1986)

**ФАЗОВЫЙ СОСТАВ  
ЭЛЕКТРОВЗРЫВНЫХ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИХ ТИТАН-БОР-МЕДНЫХ  
ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЁВ**

*Романов Д.А.\*, Будовских Е.А., Громов В.Е.*

Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия

\*E-mail: romanov\_da@physics.sibsiu.ru

Титан-бор-медные материалы обладают стойкостью к электрической эрозии на порядок более высокой по сравнению с контактной медью [1]. Цель настоящей работы заключалась в формировании титан-бор-медных поверхностных слоёв методом электрического взрыва проводников и изучении фазового состава их поверхности.

Электровзрывную обработку проводили с использованием лабораторной установки ЭВУ 60/10 [2]. Она включает ёмкостный накопитель энергии и импульсный плазменный ускоритель, состоящий из коаксиально-торцевой системы электродов с закреплённым на них проводником, разрядной камеры, локализирующей продукты взрыва и переходящей в сопло, по которому они истекают в вакуумную технологическую камеру с остаточным давлением 100 Па. Электровзрыв происходит в результате пропускания через проводник тока большой плотности при разряде накопителя. Рентгеноспектральные исследования поверхности проводили с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-2.

Формирование титан-бор-медных покрытий проводили при электровзрыве титановой фольги (титан марки ВТ 1–0) с размещённой на ней навеской аморфного бора. Обработке подвергали образцы электротехнической меди М1 с размерами  $20 \times 30 \times 2$  мм при поглощаемой плотности мощности  $7.6 \text{ ГВт/м}^2$  (режим 1),  $6.5 \text{ ГВт/м}^2$  (режим 2),  $5.5 \text{ ГВт/м}^2$  (режим 3), которые ориентировали перпендикулярно к оси плазменной струи.

Рентгеноспектральные исследования показали, что во всех режимах обработки формируются поверхностные слои, содержащие бориды титана  $\text{TiB}_2$ ,  $\text{Ti}_2\text{B}$ ,  $\text{Ti}_3\text{B}_4$ ,  $\text{TiB}$  и медь. Во всех режимах обработки устойчиво синтезируется диборид титана. Это можно связать с тем, что первыми в равновесных условиях кристаллизации выпадают именно кристаллы  $\text{TiB}$  при  $3225 \text{ }^\circ\text{C}$  в области гомогенности 66...68 % (В) [3]. В режиме 3 уменьшается содержание фазы  $\text{Ti}_3\text{B}_4$ . Это можно связать с тем, что для её синтеза необходимо 57% бора, в тоже время кристаллизующийся расплав обеднён бором, из-за первичной кристаллизации диборида титана. Режим 3 наименее интенсивный и в этом случае перемешивание расплава наиболее слабое. Также формирование этой фазы происходит при содержании бора 59 % и  $2200 \text{ }^\circ\text{C}$ . Образование фазы  $\text{Ti}_2\text{B}$  связано с неравновесными высокоскоростными условиями кристаллизации. Содержание меди во всех режимах обработки не изменяется.

Таким образом, сформированы электротехнические слои, состоящие из боридов титана и меди.

*Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (гос. контракт № П332).*

1. Анисимов А.Г., Мали В.И., Физика горения и взрыва, 2, 135 (2010)
2. Багаудинов А.Я., Будовских Е.А., Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Физические основы электровзрывного легирования металлов и сплавов., СибГИУ (2007)
3. Диаграммы состояния двойных металлических систем / под общей редакцией Лякишева; т.1, Машиностроение (1996)

**НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗУЧЕНИЯ МАРТЕНСИТНОГО  $\gamma \rightarrow \alpha'$  ПРЕВРАЩЕНИЯ  
В СТАЛИ 12X18H10T, НЕОБЛУЧЁННОЙ И ОБЛУЧЁННОЙ НЕЙТРОНАМИ,  
ДЕФОРМИРОВАННОЙ В ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР от  $-100$  до  $+20$  °С**

*Максимкин О.П., Мережко М.С., Рубан С.В.\*, Рыбин С.В.*

Институт Ядерной Физики, г. Алматы, Казахстан

\*E-mail: rubanserg@gmail.com

Фазово-структурные изменения, индуцированные облучением, как известно, существенным образом влияют на эксплуатационные характеристики материалов активных зон ядерных реакторов на быстрых нейтронах. Среди них особое место занимают бездиффузионные мартенситные превращения, протекающие в аустенитных нержавеющей сталях при одновременном воздействии радиации, термических и механических напряжений.

Роль  $\gamma \rightarrow \alpha$  ( $\gamma \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha$ ) – превращений в изменении прочностных, пластических и коррозионных свойств сталей особенно возрастает на этапе декомиссии реактора, при выполнении операций по перегрузке и транспортировке отработавших тепловыделяющих сборок, что связано с возможным образованием в сталях хрупкой мартенситной  $\alpha$ -фазы.

Наиболее систематизировано и полно мартенситные превращения в облученных реакторных сталях (08X16H11M3, 12X18H10T, X18H9), исследованы в работах [1-3], где выявлены закономерности влияния облучения нейтронами (ВВР-К, БН-350) и заряженными частицами (У-150) на кинетические параметры  $\gamma \rightarrow \alpha$ -перехода, сопровождаемого тепловыми эффектами, а также изменением механических и магнитных свойств.

В продолжении этих работ в лаборатории радиационного материаловедения ИЯФ НЯЦ РК в последнее время проведен цикл исследований особенностей фазовых превращений в метастабильных аустенитных сталях, содержащих дефекты радиационного происхождения. Эксперименты на растяжение выполняли с использованием специально разработанной камеры для проведения низкотемпературных (до  $-185$  °С) механических испытаний на базе машины «Инстрон 1195».

В настоящей работе приведены и обсуждаются результаты этих исследований. В частности, проведены механические испытания стали 12X18H10T, необлученной и облученной нейтронами (ВВР-К,  $\Phi_t=4 \cdot 10^{18}$ ;  $1,9 \cdot 10^{19}$ ;  $9 \cdot 10^{19}$  н/см<sup>2</sup>;  $E > 0,1$  МэВ;  $T_{обл.} < 80$  °С). Стальные плоские образцы подвергали одноосному растяжению в диапазоне температур от  $-100$  до  $+20$  °С. Пошаговая регистрация геометрических размеров образца и замеры ферромагнитной  $\alpha'$ -фазы позволили получить кривые в координатах «истинные напряжения – истинные деформации» и «количество  $\alpha$ -фазы – истинные деформации».

При температуре испытания  $-60$  °С обнаружен эффект аномально высокой пластичности нержавеющей стали, облученной нейтронами.

1. Тиванова О.В. Процессы локализации деформации, сопровождаемые структурно-фазовыми изменениями в металлах (Ni, Mo) и сплавах (12X18H10T, 08X16H11M3, 03X20H45M4БРЦ), облученных нейтронами и альфа-частицами, Автореф.дисс. к.ф.-м.н., Алматы, 24 (2008)
2. Токтогулова Д.А., Тепловые эффекты на различных стадиях пластического течения поликристаллических металлов и сплавов (Fe, Ni, 12X18H10T, 03X20H45M4БЧ), облученных нейтронами", Автореф.дисс. к.ф.-м.н., Алматы, 24 (2009)
3. Бердалиев Д.Т., Исследование прямого мартенситного  $\gamma \rightarrow \alpha'$  превращения, индуцированного деформацией, в нержавеющей сталях 12X18H10T и 12X18H9, облученных нейтронами и заряженными частицами", Автореф.дисс. к.ф.-м.н., Алматы, 24 (2010)

**ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСЕЙ Pd  
НА ЭНЕРГИЮ ОБРАЗОВАНИЯ ВАКАНСИИ В ОЦК-ЖЕЛЕЗЕ**

*Рузанова Г.Е.\**, *Мирзоев А.А.*

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

\*E-mail: ruzanova@physics.susu.ac.ru

Перспективными конструкционными материалами для реакторов деления и термоядерного синтеза в настоящее время признаются, имеющие ОЦК структуру ферритно-мартенситные стали. Одной из наиболее интересных и практически важных проблем в радиационном материаловедении является проблема радиационного распухания сталей. Вакансии, образующиеся под действием нейтронного излучения «конденсируются», образуя поры в материале. В результате металл разрыхляется, его прочностные характеристики ухудшаются. Для создания модели, прогнозирующей поведение ферритных материалов под действием нейтронных полей также немаловажным является вопрос взаимодействия образовавшихся вакансий с примесями, присутствующими в металле, и как они могут повлиять на число вакансий. Таким образом, настоящая работа посвящена первопринципному моделированию взаимодействия точечных дефектов с атомами замещения в ОЦК-железе на примере взаимодействия атом Pd – вакансии.

Расчет электронной структуры проведен методом линейных присоединённых плоских волн (LAPW) с учетом обобщённого градиентного приближения (GGA). В качестве модели была выбрана суперячейка, состоящая из 54 атомов; параметр решётки  $a = 2.84 \text{ \AA}$  (равновесный параметр для решётки чистого ОЦК-железа [1]); количество  $k$ -точек  $n_k = 27$ .

Было определено значение энергии образования вакансии в чистом железе  $E_{\text{vac}} = 2.15 \text{ эВ}$ , что соответствует экспериментальным данным [2]. Далее был проведён расчёт энергии образования вакансии в системе с примесью по формуле [3]:

$$E_{\text{vac}}^f = E_2 - \left( E_1 - \frac{1}{54} E_0 \right),$$

где  $E_0$  – энергия чистого железа,  $E_1$  – энергия системы с примесью (без вакансии),  $E_2$  – энергия системы с примесью и вакансией. Для получения более точного результата системы были отрелаксированы. В табл. 1 приведены результаты изменения энергии образования вакансии при добавлении атома Pd в одно из окружений вакансии.

Таблица 1. Изменение энергии образования вакансии в присутствии атома Pd

Номер координационной сферы		1	2	3	5
$\Delta E_{\text{vac}}^f$ , эВ	Результаты работы	-0.37	-0.13	-0.15	-0.10
	[4]	-0.30	-0.20	-0.08	-0.03

Таким образом, было показано, что замещение одного из атомов железа атомом Pd приводит к снижению энергии образования вакансии на 0.1 – 0.4 эВ в зависимости от положения атома Pd по отношению к вакансии.

*Работа поддержана грантом №02.740.11.0539 Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России».*

1. Урсаева А.В., Рузанова Г.Е., Мирзоев А.А., Вестник ЮУрГУ, Серия «Математика, физика, химия», **9**, 97 (2010)
2. De Schepper H.L., Segers D., Dorikens-Vanpraet L., Phys. Rev. B, **27**, 5257 (1983)
3. Terentyev D., Olsson P., Malerba L., J. Nucl. Mater., **386-388**, 140 (2009)
4. Olsson P., Klaver T.P., Domain C., Phys. Rev. B, **81**, 054102 (2010)

**ФОРМИРОВАНИЕ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ ФАЗЫ ПРИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ  
В УПОРЯДОЧЕННОМ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОМ СПЛАВЕ FePd**

Сташкова Л.А.<sup>1\*</sup>, Гавико В.С.<sup>1</sup>, Власова Н.И.<sup>1</sup>, Попов А.Г.<sup>1</sup>, Гундеров Д.В.<sup>2</sup>, Савадж К.<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup>Институт физики перспективных материалов УГАТУ, г. Уфа, Россия

<sup>3</sup>Университет Руана, г. Руан, Франция

\*E-mail: lshreder@imp.uran.ru

Известно, что эквиатомные сплавы FePd в атомно-неупорядоченном состоянии обладают кристаллической решёткой с пространственной группой симметрии  $Fm\bar{3}m$  (A1-фаза), а после отжига в них формируется упорядоченная тетрагональная  $L1_0$ -фаза с пространственной группой симметрии  $P4/m\bar{m}m$ . В соответствии с симметричными теориями фазовых превращений в процессе структурного перехода  $A1 \rightarrow L1_0$  может возникнуть низкосимметричная неупорядоченная объёмно-центрированная тетрагональная (ОЦТ) фаза. В [1], исходя из результатов поляризационно-оптических, электронно-микроскопических и термомагнитных исследований фазовых превращений в монокристаллах FePd, сделан вывод о существовании ОЦТ фазы. В данной работе приведены результаты экспериментального обнаружения ОЦТ фазы при рентгенографическом исследовании структурных превращений в эквиатомном сплаве FePd, подвергнутом интенсивной пластической деформации (ИПД) в упорядоченном состоянии и последующему отжигу.

После отжига при 550° в течение 18 часов сплав FePd находится в полностью упорядоченном состоянии ( $L1_0$ -фаза). Об этом свидетельствуют тетрагональное расщепление основных рефлексов и наличие узких сверхструктурных пиков на дифрактограмме. На дифрактограмме упорядоченного образца подвергнутого осадке ( $P = 6$  ГПа,  $n = 0$ ) отсутствуют сверхструктурные рефлексы, а основные асимметрично уширены. Это означает, что дальний порядок в чередовании атомов нарушен, но тетрагональность решётки сохраняется. По данным РСА в этом состоянии образец содержит 80% ранее не наблюдавшейся в сплавах данного типа ОЦТ фазы (A6, пр. гр.  $I4/m\bar{m}m$ ) и 20% разупорядоченной ГЦК фазы (A1). Элементарная ячейка A6 фазы повёрнута на 45° относительно ячейки A1 фазы вокруг одной из кристаллографических осей куба, в ОЦТ ячейке эта ось становится  $c$ -осью. Возможно, что наличие этой фазы связано с сохранением локальных ультрадисперсных  $L1_0$  областей. Последующая деформация кручением приводит к фазовому переходу  $A6 \rightarrow A1$ . Но даже после кручения на 10 оборотов, около 30% ОЦТ фазы содержится в образце. Отжиг деформированного образца приводит к превращению  $A1 \rightarrow A6 \rightarrow L1_0$ .

Таким образом, при фазовых превращениях  $L1_0 \leftrightarrow A1$  в эквиатомном сплаве FePd, подвергнутом ИПД, образуется низкосимметричная неупорядоченная объёмно-центрированная тетрагональная фаза A6. Упорядочение атомов происходит в тетрагонально-искажённой решётке.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ проект № 07-02-92180-НЦНИ\_a и РАН проект № 09-П-2-1035.*

1. Н.И. Власова, Н.Н. Щеголева, А.Г. Попов, Г.С. Кандаурова, Ферроупругие домены и фазы в ферромагнитном наноструктурированном сплаве FePd, ФММ, **110**, 5, 470-485 (2010)

## О ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В НИОБИИ МЕТОДОМ КРУЧЕНИЯ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ ПРИ КРИОГЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

*Столбовский А.В.\*, Попов В.В., Попова Е.Н., Пилюгин В.П.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: stolbovsky@imp.uran.ru

В работе [1] было показано, что в Nb, при проведении кручения под высоким давлением (КВД) при комнатной температуре после 5 оборотов достигается состояние насыщения, при котором дальнейшее увеличение степени деформации уже не приводит к измельчению структуры и росту микротвёрдости. При этом достигается субмикроструктурная структура с размерами кристаллитов 100–120 нм и микротвёрдостью ~2500 МПа. Одним из возможных способов получить более дисперсную структуру и более высокую твёрдость является понижение температуры деформации. В данной работе ставилась цель провести анализ возможностей наноструктурирования Nb посредством проведения КВД в жидком азоте и исследовать термическую стабильность получаемой структуры. Методами просвечивающей электронной микроскопии изучена эволюция структуры ниобия при КВД в жидком азоте и последующем отжиге в интервале 100–600 °С. После деформации кручением на один оборот в жидком азоте Nb приобретает в основном ячеистую структуру с высокой плотностью дислокаций.

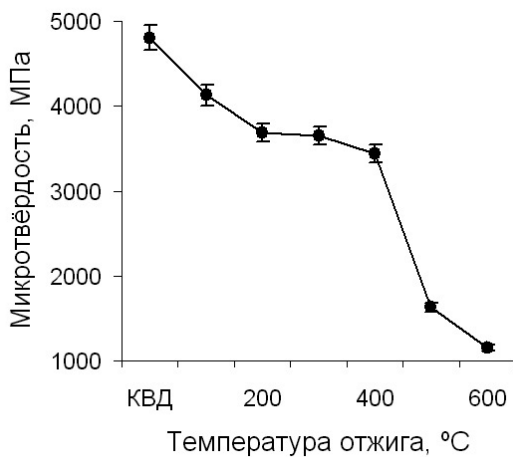


Рис. 1. Микротвёрдость Nb после КВД на 3 оборота при 80 К в зависимости от температуры отжига

Увеличение степени деформации до 3 оборотов приводит к значительному изменению структуры по всему объёму образца. Структура становится однородной нанокристаллической со средним размер зёрен 75 нм. Внутри зёрен наблюдается характерный для состояния после КВД так называемый «изогнутый контраст», свидетельствующий о высоком уровне внутренних напряжений, а все электрограммы — кольцевые, с почти сплошными дебаевскими кольцами из ярких точечных рефлексов, не вытянутых в азимутальном направлении. Микротвёрдость образца достигает рекордного для ниобия значения 4800 МПа.

Важнейшей проблемой материалов с субмикроструктурной структурой является их более низкая термическая стабильность по сравнению с обычными поликристаллами. При температурах 100–200 °С фиксируется небольшое снижение микротвёрдости (Рис. 1),

тогда как структура и размер кристаллитов практически не изменяются. При повышении температуры отжига до 300 °С размеры кристаллитов меняются мало, но в структуре наряду с дисперсными кристаллитами (менее 100 нм) появляются относительно крупные зёрна размером более 300 нм с низкой плотностью дислокаций. При нагреве до 400 °С эти процессы получают дальнейшее развитие. А при отжигах начиная с 500 °С, уже фиксируется интенсивный рост зёрен и структура становится микроструктурной.

*Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект 10-03-00530) и Президиума РАН (программа фундаментальных исследований «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов»).*

1. Попова Е.Н., Попов В.В., Романов Е.П., Пилюгин В.П., ФММ, **103**, 4 (2007)

**СТРУКТУРА МОНОКРИСТАЛЛА  $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_{3+\delta}$   
ВЫРАЩЕННОГО МЕТОДОМ БЕСТИГЕЛЬНОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКИ**

*Телегин С.В.<sup>1,2\*</sup>, Елохина Л.В.<sup>2</sup>, Костромитина Н.В.<sup>2</sup>, Наумов С.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: telegin1990@rambler.ru

Значительное место в ряду исследований манганитов лантана  $\text{La}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$  занимают исследования монокристаллов, выращенных методом зонной плавки [1]. Отмечается [2], что качество монокристаллов манганитов лантана зависит от коэффициента распределения  $K$  легирующего А – элемента в твёрдом состоянии и в жидком. Са имеет наименьший коэффициент распределения в ряду легирующих элементов Sr, Ba, что приводит к трудностям при выращивании монокристаллов в системе (LaCa)MnO. Каждый выращенный кристалл представляет собой отдельный объект исследования, с отличным от других набором – структура, состав, свойства.

Цель работы – выбор оптимальных условий выращивания монокристаллов манганитов в системе лантан-кальций, получение монокристалла заданного состава.

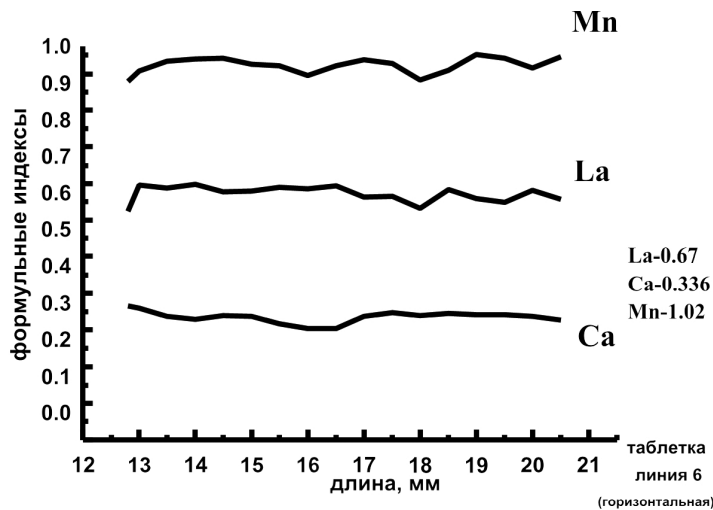


Рис. 1. Диаграмма распределения элементов в поперечном сечении монокристалла  $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_{3+\delta}$ , полученная с помощью РМА

Методом бестигельной зонной плавки был выращен монокристалл  $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_{3+\delta}$ . С помощью рентгенофазового анализа (РФА) и рентгеновского микроанализа (РМА) было проведено исследование структуры и состава образца вдоль и поперёк оси роста. При исследовании монокристалла вдоль оси роста было показано, что содержание Са меняется от ~25% до ~34%. Исходя из этого было выбрано поперечное сечение с составом близким к номинальному. Из кристаллического цилиндра высотой  $h = 60$  мм и диаметром  $\varnothing = 8$  мм был вырезан монокристаллический образец с  $h = 5$  мм и  $\varnothing = 8$  мм, в котором распределение элемен-

тов соответствует исходному составу La,Ca,Mn.

На Рис.1 показано распределение La,Ca,Mn элементов, полученное методом РМА в поперечном сечении монокристалла. РФА образца в данном сечении показал, что монокристалл имеет орторомбическую структуру с параметрами решетки  $a = 5.478 \text{ \AA}$ ,  $b = 5.452 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.729 \text{ \AA}$ .

Выводы: В ходе работы были подобраны условия выращивания монокристалла

$\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_{3+\delta}$ : скорость роста, скорость вращения затравки и заготовки, и т.д. Был выделен массивный монокристаллический блок с распределением элементов соответствующим исходному составу.

1. A.M. Balbashov, S.G. Karabashev, Ya.M. Mukovskiy et. al., J. Cryst. Growth, **167**, 365 (1996)
2. N.G. Bebenin, R.I. Zainullina, V.V. Ustinov. JMMM, **322**, 963 (2010)

**IN SITU БАРИЧЕСКАЯ И ДЕФОРМАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТИ СОПРОТИВЛЕНИЯ  
СДВИГУ ГЦК (Cu, Ag, Au, Fe-Ni) МЕТАЛЛОВ**

*Толмачёв Т.П.\* , Брытков Д.А., Пилюгин В.П.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: timpt@mail.ru

Выполнено исследование влияния высокого давления и деформации на сопротивление сдвигу некоторых ГЦК благородных металлов в диапазоне температур 80–300 К. Деформацию дисковых образцов диаметром 5 мм и начальной толщиной 0.30 мм проводили на твёрдосплавных наковальнях в камере Бриджмена от 1 до 15 ГПа. Низкотемпературное деформирование 80 К осуществляли, помещая блок наковален в ванну с жидким азотом. Деформацию под давлением и измерение напряжения сдвига *in situ* осуществляли при постоянных температурах: комнатной 293 К, температуре жидкого азота и при изменениях температуры в интервале 80–293 К при охлаждении и отогреве. Момент силы сопротивления образцов измеряли электронным динамометром АЦДС-1И-1 с выводом данных на ПК.

Установлено, что барическая зависимость сопротивления сдвигу металлов выше критического давления «непроскальзывания» образцов по поверхности пуансонов в рамках точности измерений имеет линейный характер:  $\mu = \mu(P)$  исследованных металлов линейно растёт при увеличении давления. Температурная зависимость сопротивления сдвигу  $\mu = \mu(T)$  в интервале 80–300 К качественно подобна зависимости модуля сдвига металла от температуры. Сопротивление сдвигу обратно пропорционально сжимаемости металла. Экстраполяцией барической зависимости получены данные напряжения сдвига металлов при атмосферном давлении: 230; 320 и 370 МПа, коэффициенты трения металлов по ВК-6: 0.10; 0.11 и 0.12 для серебра, меди и палладия соответственно. Барическая скорость роста  $\frac{d\mu}{dP}$  лежит в интервале 0.015-0.016.

Кривые сопротивления сдвигу от деформации  $\mu = \mu(\epsilon)$ , при постоянных давлении и температуре, состоят из параболической части, отвечающей стадии формирования нанокристаллических структур, и линейной, на которой сопротивление сдвигу выходит на насыщение, что отвечает сформировавшимся диссипативным структурам.

*Работа выполнена по плану РАН (тема «Импульс»), при частичной финансовой поддержке Программы Президиума РАН «Физика сильно сжатого вещества» 09-П-2-1019, 09-П-2-1036.*



## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДОРОДА С ВАКАНСИЕЙ ОЦК-ЖЕЛЕЗА

Урсаева А.В.\*, Мирзоев А.А.

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

\*E-mail: ursaeva@physics.susu.ac.ru

Явление водородной деградации эксплуатационных свойств ОЦК-сплавов железа, обнаруженное более ста лет назад, в последние десятилетия привлекает особое внимание. Также известно, что растворяясь в ОЦК-железе, водород, благодаря своему малому радиусу, занимает междоузлия в кристаллической решетке. Если в металле присутствует вакансия, то водород взаимодействует с ней, образуя кластеры водород-вакансия. Все это в свою очередь влияет на кинетические и термодинамические свойства материала. В связи совсем сказанным, целью данной работы являлось первопринципное моделирование взаимодействия водорода с вакансией ОЦК-железа.

Все расчеты проводились методом линейных присоединенных плоских волн (LAPW) с учетом обобщенного градиентного приближение (GGA'96) в программном пакете WIEN-2k. В качестве модели была выбрана суперячейка ОЦК-железа из 54 атомов; параметр решетки  $a = 2.84 \text{ \AA}$  [1], количество  $k$ -точек  $n_k = 27$ .

Было определено значение энергии образования вакансии  $E_{\text{vac}}^f = 2.15 \text{ эВ}$ , что неплохо согласуется с экспериментальными значениями ( $1.6 \div 2.2 \text{ эВ}$ ) [2].

Затем было найдено равновесное положение атома водорода в ячейке с вакансией.

Оно соответствовало положению водорода на расстоянии  $0.34 \text{ \AA}$  от октапоры. Это значение хорошо согласуется с экспериментом  $0.4 \pm 0.1 \text{ \AA}$  [3].

Также была определена энергия захвата атома водорода, которая рассчитывалась по следующей формуле:

$$\Delta E(N, m, k) = E(N - 1, m, k - 1) - E(N - 1, m, k) + E(N, 0, 1) - E(N, 0, 0),$$

где  $E(N, m, k)$  – энергия системы, состоящей из  $N = 54$  атомов железа,  $m = 1$  вакансий и  $k = 1$  атомов водорода.

В таблице 1 приведено сравнение полученных результатов с экспериментальными и с результатами, представленными в других работах.

	ADF2000 [4]	VASP [5]	Эксперимент [6]	Данная работа
$\Delta E, \text{эВ}$	0.71	0.68	0.63	0.58

Таблица 1. Сравнение полученных результатов с литературными данными.

Показано, что энергия образования системы «водород+вакансия» понижается в сравнении с энергией образования моновакансии на величину  $1.57 \text{ эВ}$ . Это обстоятельство может приводить к существенному росту концентрации вакансий при комнатной температуре.

*Работа поддержана грантом №02.740.11.0539 Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России».*

1. Урсаева А.В., Рузанова Г.Е., Мирзоев А.А., Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия», **9**, 97 (2010)
2. De Schepper H.L., Segers D., Dorikens-Vanpraet L., Phys. Rev. B, **27**, 5257 (1983)
3. Myers S.M., Reviews of Modern Physics, **64**, 559 (1992)
4. Ramasubramaniam A., J. Mater. Res., **23**, 2757 (2008)
5. Estela Pronsato M., J. Phys.: Condens. Matter, **16**, 6907-6916 (2004)
6. Besenbacher F., J. Appl. Phys., **61**, 1788 (1987)

## ВЛИЯНИЕ ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ТЕКСТУРУ И РАЗМЕРЫ ОБЛАСТЕЙ КОГЕРЕНТНОГО РАССЕИВАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ ВОЛОКОН

Фёдоров С.И.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

\*E-mail: feodor0101@mail.ru

Уникальные физико-механические свойства углеродного волокна (УВ) обусловлены особенностями его микроструктуры, в том числе размерами областей когерентного рассеивания (ОКР) и высокой степенью текстуры относительно оси нитей. Формирование конечной структуры высокомодульного УВ развивается, как правило, в процессе высокотемпературной (до 3000 °С) термообработки. В работе рассматриваются результаты сравнительных исследований структуры углеродных волокон Formoza, Torayca, Toho Tenax и ВМН-4ПК, прошедших термообработку при одинаковых условиях при 2100 и 3000 °С. Текстурные исследования волокон выполнены с помощью рентгеновского дифрактометра D8 ADVANCE, Bruker (фильтрованное  $\text{CuK}_\alpha$ -излучение). В качестве характеристики текстуры использовалась величина F (фактор текстуры), равная отношению суммы площадей дифракционных максимумов 002 ОКР, ориентированных под углами от 0 до 3 градусов к оси волокна, к сумме площадей всех достаточно интенсивных максимумов 002, регистрируемых с шагом 1 градус в угловом интервале от 0 до 7 градусов. Средние размеры ОКР и межплоскостное расстояние определяли по интегральной ширине и по центру тяжести дифракционных максимумов.

Показано, что после термообработки при 2100 °С средние размеры ОКР волокна Toho Tenax превосходят таковые других волокон почти в два раза, размеры ОКР  $L_{002} = 3$  нм, при этом фактор текстуры оказался наименьшим.  $L_{002}$  и межплоскостное расстояние  $d_{002}$  исследованных волокон не зависят от угла ориентации к оси нити.

Повышение температуры дополнительной термообработки с 2100 до 3000 °С активизирует процесс направленной перекристаллизации материала наноструктурированного УВ. Средние размеры ОКР  $L_{002}$ , ориентированных параллельно оси нити, возрастают до 8.5–10 нм. При увеличении угла ориентации с 0 до 7 градусов для всех исследованных образцов наблюдается постепенное уменьшение размеров  $L_{002}$  и увеличение  $d_{002}$ .

Фактор текстуры F материала исследованных волокон после дополнительной термообработки при 3000 °С увеличивается примерно на 17%. В полученных высокомодульных УВ до 70% ОКР оказываются ориентированными относительно оси нити в пределах телесного угла 4 градуса.

Таблица 1. Параметр текстуры исследованных углеродных волокон

Исследуемое углеродное волокно	Параметр текстуры F		
	Исходное волокно	Температура обработки	
		2100 °С	3000 °С
Torayca	0.59	—	0.66
Formoza	0.58	0.59	0.68
Toho Tenax	0.56	0.58	0.69
ВМН-4	—	0.59	0.66

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ СКОЛА МОНОКРИСТАЛЛА ВИСМУТА С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

*Хрипунов Ю.В.*

Орловский государственный университет, г. Орел, Россия

E-mail: Phyrexia@yandex.ru



Рис. 1. АСМ-кадр скола монокристалла висмута при комнатной температуре (слева) и температуре азота (справа).

Висмут – полуметалл, многообразие свойств которого позволило создать множество приборов с широким комплексом полезных свойств. На современном этапе развития микро- и нанoeлектроники параметры приборов определяются структурой поверхности кристаллов и для создания на основе висмута новых конструкционных материалов необходимы исследования структуры его поверхности. В работах [1-3] исследования проводились с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), в данной работе для контроля за конфигурацией поверхности использовался метод атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Целью исследований является получение новой информации о структуре поверхности скола монокристалла висмута и выяснение возможных причин дефектообразования. Монокристаллы висмута выращивались методом зонной перекристаллизации, скалывание производилось по плоскости (111) при комнатной температуре и после охлаждения в жидком азоте (Рис. 1). Видно, что скалывание монокристалла висмута при комнатной температуре ведёт к высокой дефектности поверхности, связанной с пластической деформацией. Высота ступеней между террасами составляет от 15 до 70 нм, ширина террас меняется от 13 до 1300 нм, наклон принимает значения от 2.7° до 4.1°. Снижение температуры скалывания до азотной позволяет получить менее дефектный скол с меньшим количеством террас шириной до 800 нм - 2.5 мкм, высотой ступеней до 1.5 - 15 нм и наклоном менее 0.5°.

Итак, результаты, полученные при АСМ-исследовании, дают новую информацию о структуре поверхности скола монокристалла висмута, дополняющую СТМ-исследования. Из анализа АСМ-кадров видно, что скалывание кристалла при комнатной температуре ведёт к высокой дефектности поверхности, связанной с пластической деформацией. Снижение температуры скалывания до азотной позволяет получить менее дефектный скол. Результаты АСМ- и СТМ- исследований позволяют сформировать общую картину структуры поверхности скола монокристалла висмута.

1. Трояновский А.М., Эдельман В.С., Письма в ЖЭТФ, **60**, 104 (1994).
2. Эдельман В.С., УФН, **175**, 1111, (2005)
3. Хрипунов Ю.В., Марков О.И. Учёные записки ОГУ, **32**, 27 (2009)

## ВЫСОКОПРОЧНЫЕ КОРРОЗИОННОСТОЙКИЕ АЛЮМИНИЙСОДЕРЖАЩИЕ СТАЛИ ДЛЯ УПРУГИХ ЭЛЕМЕНТОВ

*Мальцева Л.А., Озерец Н.Н., Шаранова В.А., Левина А.В.*

Министерство образования и науки Российской Федерации Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»

E-mail: mla44@mail.ru

Разработаны новые практически безуглеродистые высокопрочные алюминийсодержащие стали на железохромоникелевой основе, сочетающие высокую прочность, коррозионную стойкость, упругость и теплостойкость. Варьирование содержания хрома, никеля и увеличение содержания алюминия от 0,25 до 6,0 % обеспечило возможность перевода сталей в разные структурные классы в последовательности: мартенситностарееющий → аустенитный → аустенитно-ферритный → ферритный.

Показано, что аустенит в аустенитных и аустенитно-ферритных сталях является метастабильным и при пластической деформации практически полностью переходит в мартенсит деформации. Влияние образования мартенсита деформации и связанного с ним трип-эффекта неодинаково. Наиболее сильно выраженный трип-эффект имеет место стали аустенитного класса 03X14N11K5M2ЮТ, что является одним из факторов, определяющих её высокую прочность, позволяет проводить холодную пластическую деформацию волочением с чрезвычайно высокими степенями обжатия и получить в структуре нанокристаллическое состояние.

Старение деформированных сталей вызывает дополнительное повышение механических свойств, которое связано с процессами распада пересыщенного ОЦК-твёрдого раствора. Установлено, что фазой, ответственной за упрочнение исследуемых алюминийсодержащих сталей при старении, является интерметаллидная фаза типа NiAl.

Образовавшиеся выделения интерметаллидной фазы типа NiAl имеют нанокристаллические размеры (6...10 нм), что является чрезвычайно важным фактором при получении проволоки тончайших диаметров.

Реализация всех возможных механизмов упрочнения позволила отработать технологию получения высокопрочной проволоки для упругих элементов тонких сечений.

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПРОЦЕССОВ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ***Ярославцев А.А.<sup>1\*</sup>, Толмачев Т.П.<sup>2</sup>, Брытков Д.А.<sup>2</sup>, Пилюгин В.П.<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Уральский государственный университет, г. Екатеринбург, Россия<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Yaroslvtcev.a@mail.ru

При обработке материала давлением в современных высокотехнологических методах невозможно прямое наблюдение его поведения. Но для определения степени деформации, характера течения, интенсивности процесса и характера развития течения в очаге деформации при интенсивных деформационных обработках необходимо прямое наблюдение. На сплошных пластичных средах, идентичных по механическим свойствам, но контрастных по цвету и поэтому удобных для непосредственного визуального контроля проведено моделирование ряда деформационных процессов. Исходно геометрически правильные по форме элементы с чёткими границами подвергали действию интенсивной пластической деформации (ИПД) в различных схемах и режимах деформирования: 1 – экструзии, 2 – равноканального углового прессования (РКУП), 3 – многоугольного РКУП и 4 – сдвига под давлением (камера Бриджмена). Для выяснения влияния геометрических отношений в очаге деформации в различных методах на степень деформации и характер течения проведены серии измерений для:

- метода 1 по соотношению исходного и конечного диаметров;
- метода 2 от угла поворота и числа повторов;
- метода 3 от значения угла, числа колен и отношения ширины канала к величине ступени;
- метода 4 от толщины слоя, радиуса и угла поворота.

Выявлены оптимальные геометрические параметры для проработки материала. Экспериментально смоделировано близкое к однородному по цвету состояние, отвечающее реальным деформационно-иницированным субмикро- и нанокристаллическим структурам в ранее исследованных металлах и сплавах.

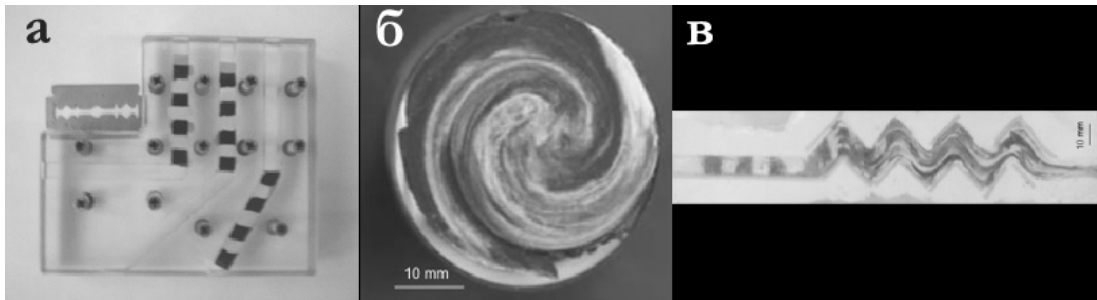


Рис. 1. Фотография а – равноканальное угловое прессование (РКУП), б – сдвиг под давлением, в – многоугольное РКУП



# **НЕРАЗРУШАЮЩИЙ КОНТРОЛЬ**





**АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА НЕРАЗРУШАЮЩЕГО АНАЛИЗА  
ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛЛОВ  
МЕТОДОМ ЭКСИТОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ**

*Кормильцев И.В.\**

Калмыцкий государственный университет, Элиста, Россия

\*E-mail: kormiltsev\_iv@kalmsu.ru

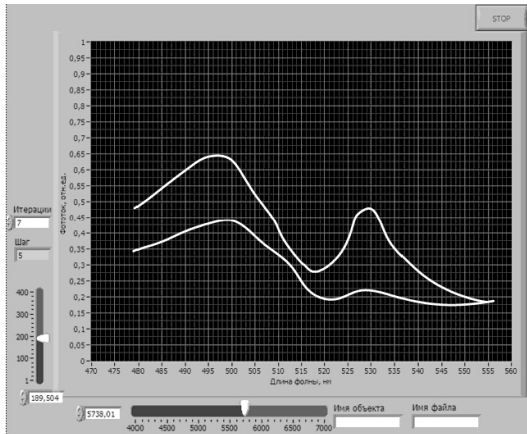


Рис. 1. Спектры фототока кристалла CdS

Существующие на данный момент химические и физико-химические методы анализа, отклик системы на внешнее воздействие в которых обусловлен химическими превращениями (реакциями), являются разрушающими. То есть любая структурная информация и информация о морфологии объекта утрачивается на стадии пробоподготовки. Поэтому в случае исследования низкоразмерных материалов, когда эта информация является определяющей, единственной альтернативой являются физические методы анализа, то есть методы, функция отклика в которых формируется как результат взаимодействия падающего излучения, потока частиц, какого либо поля с веществом. Задачей, решавшейся в данной работе, была модернизация универсального спектрального вычислительного комплекса, позво-

ляющего производить исследования фотоэлектрических спектров кристаллов CdS и CdSe методом экситонной спектроскопии, а также создание системы автоматизированных измерений (САИ) фотоэлектрических характеристик кристаллов (ФСХ) и гетероструктур на основе соединений  $A_2B_6 - A_3B_5$ , удовлетворяющая следующим условиям:

- САИ должна базироваться на существующем стандартном оборудовании (монохроматор типа МДР23 и ПЭВМ РС) и быть достаточно дешёвой;
- САИ должна реализовывать эффективные алгоритмы выделения сигнала из смеси с широкополосными шумами и сетевыми наводками;
- система должна обладать развитым пользовательским интерфейсом, позволяющим экспериментатору гибко управлять параметрами измерительной установки, оперативно отслеживать результат измерений и максимально освобождать от объёмных операций по обработке данных.

На рис.1. представлена одна из вкладок передней панели виртуального прибора, с помощью которой отображается график фотопроводимости кристаллов CdS, CdSe. На ней имеются средства управления исследуемой спектральной областью, скорости развёртки, записи результатов и т.д. (рис.1.). Управление САИ ведется с помощью терминала ПЭВМ. Программа управления score.vi представляет пользователю графический интерфейс, который позволяет работать как в автоматическом режиме[1], так и в «ручном». Для этого на блоке питания шагового двигателя имеется переключатель.

В результате проведённой работы была создана автоматизированная экспериментальная установка на базе монохроматора МДР23 для получения фотоэлектрических спектров кристаллов CdS, CdSe и гетероструктур на основе соединений  $A_2B_6 - A_3B_5$ . Разработанная система автоматизированного сбора информации позволяет существенно повысить точность и эффективность измерений фотоэлектрических спектров кристаллов[1].

1. Кормильцев И.В., Сусляков Ю.В., Прикладная физика, 4, 119 (2010)

## ЭМА СКАНЕР-ДЕФЕКТОСКОП ДЛЯ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

*Михайлов А.В.\**, Гобов Ю.Л., Смородинский Я.Г.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: mikhaylov@imp.uran.ru

ЭМА сканер - дефектоскоп предназначен для обнаружения дефектов типа нарушения сплошности в ферромагнитных материалах с различной толщиной стенок. Принцип его действия основан на возбуждении и приёме волн Лэмба в стенке объекта контроля электромагнитно-акустическим (ЭМА) способом. Для объектов с особо большой толщиной стенок применяются волны Рэлея.

Прямое ЭМА преобразование (излучение) осуществляется при помощи тангенциального импульсного поляризованного магнитного поля, создаваемого электромагнитом, обратное ЭМА преобразование (приём) – при помощи постоянного поляризованного магнитного поля, направленного по нормали к поверхности объекта контроля.

Необходимым условием для эффективного возбуждения и приёма ультразвуковых волн ЭМА способом является наличие достаточного поляризованного магнитного поля. Напряжённость такого магнитного поля для случая тангенциальной поляризации должна составлять порядка  $3 \cdot 10^4$  А/м, для нормальной более  $5 \cdot 10^5$  А/м.

Создать такое тангенциальное поле на изделиях с большой толщиной стенки достаточно сложно: необходимо увеличивать размеры (а значит и массу) магнитной системы. Громоздкая магнитная система не может применяться в автоматическом сканере – дефектоскопе, поэтому в нем используется малогабаритная магнитная система, создающая нормальное поляризованное магнитное поле.

Такая магнитная система обладает массой менее 3 кг и на расстоянии 10 мм до объекта контроля создаёт магнитное поле с напряжённостью  $1.2 \cdot 10^6$  А/см. При этом она сохраняет работоспособность при любой толщине стенки контролируемого изделия.

## ИЗМЕРЕНИЕ УДЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ ПРИСТАВНЫМИ МАЛОГАБАРИТНЫМИ ПРИБОРАМИ

*Корх М.К., Огнева М.С.\**

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: manja\_best@e1.ru

Измерение удельного электрического сопротивления ( $\rho$ ) часто является одной из приёмосдаточных характеристик изделий. Даже, если мы имеем дело с изделиями из стали, то и в этом случае удельное сопротивление может изменяться в широких пределах: от 2 до 8 мОм/см. Требования к большим значениям удельного сопротивления предъявляются, в частности, к изделиям из аустенитных сталей, применяемым в энергетике. Это требование связано с таким фактом, что нагрев деталей может происходить за счёт протекания больших токов. Относительно большие токи (приводящие к нагреву) могут возникнуть в материале стали при условии попадания детали в большие электромагнитные поля, что часто бывает, например, на электростанциях. По закону Ома при большом напряжении и при малом значении сопротивления, по изделию потечёт большой ток, а это вызовет нагрев самого изделия, что может привести к его повреждению.

Измерение  $\rho$  проводится на специализированных стационарных установках, где на образцах-свидетелях на калиброванном расстоянии между специальными зажимами измеряют падение напряжения при пропускании через образец стабильного тока с помощью высокоградного вольтметра.

Такие установки имеются на многих предприятиях страны. Их недостатками является громоздкость и невозможность быстрой транспортировки, а также наличие дорогостоящего оборудования, в состав которого входят высокостабилизированные источники тока, а также измерители напряжения и тока.

В лаборатории магнитного структурного анализа Института физики металлов УрО РАН разработаны и внедрены на нескольких предприятиях (в г. Белгороде, г. С.-Петербурге, г. Златоусте) малогабаритные специализированные измерители электрического сопротивления и удельного электрического сопротивления.

Особенностью предложенных разработок является возможность измерения образцов с различными поперечными размерами. Так, на ОАО «ЗМЗ» (г. Златоуст) внедрён прибор, позволяющий аттестовать по величине  $\rho$  проволоку различного диаметра – от 2 до 14 мм. Другой особенностью приборов является возможность измерения  $\rho$  на различной длине образцов. Меняя первичный преобразователь, можно изменять рабочую базу от 3-х до 100 см. Приборы в настоящий момент проходят испытания для внесения в Госреестр России.

*Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских учёных - кандидатов наук МК -2716.2010.8.*

## МОБИЛЬНАЯ ПРОГРАММНО-АППАРАТНАЯ СИСТЕМА НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТАЛЬНЫХ ИЗДЕЛИЙ

*Сташков А.Н.\**, Корх М.К., Ефремов А.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: stashkov@imp.uran.ru

Началом данной работы послужили проведённые ранее исследования, в которых была показана возможность контроля магнитным методом степени пластической деформации в конструкциях из низколегированных сталей вплоть до их разрушения [1]. Кроме того, в работе [2] были обоснованно предложены параметры контроля, чувствительность которых к величине и анизотропии упругих деформаций достаточно велика. Помимо параметров кривой намагничивания и предельной петли магнитного гистерезиса (например, остаточной индукции  $B_r$ ), предложены в качестве параметров контроля критические поля смещения  $90^\circ(H_{\text{перг}})$  и  $180^\circ(H_{\text{пара}})$  доменных границ, получаемые после расчётов из полевой зависимости дифференциальной магнитной проницаемости.

Применение на практике в качестве параметров контроля вышеперечисленных параметров до настоящего времени было затруднено из-за отсутствия или несовершенства имеющихся средств измерения. Для намагничивания крупногабаритных стальных конструкций и деталей, в основном, пригодны лишь приставные электромагниты. В работе [1] была показана принципиальная возможность измерения дифференциальной проницаемости с помощью приставного П-образного устройства. Именно такой тип преобразователя и вошёл состав новой магнитометрической системы (размер полюсов магнитопровода 12x28 мм, межцентровое расстояние 32 мм). Глубина промагничивания такого датчика составляет около 6 мм.

Разработанная малогабаритная, мобильная (питание от аккумуляторов) программно-аппаратная система «МСА» предназначена для реализации одно- и многопараметровых методов контроля физико-механических характеристик изделий, для решения задач контроля напряжённо-деформированного состояния стальных конструкций, многопараметрового контроля режимов термообработки. Система позволяет в автоматическом и ручном режимах проводить измерение комплекса магнитных свойств на образцах разомкнутой формы, выполнять предварительную обработку и визуализацию измеренных данных, запоминание, накопление и комплексный анализ результатов. Программно-аппаратная система «МСА», построенная на базе мобильного персонального компьютера, объединяет в себе новые измерительные средства и оригинальное программное обеспечение. В частности, для таких задач как контроль степени пластической деформации или контроль напряжённо-деформированного состояния необходимо перемагничивать контролируемое изделие с низкой скоростью (не более 7 А/с·мс). Эта особенность была учтена при проектировании системы. Гибкость системы позволяет реализовать на её основе дополнительные магнитные измерения (например, напряжённости магнитного поля, измерение характеристик петель магнитного гистерезиса, для задач ферритометрии) путём включения в её состав дополнительных первичных преобразователей.

*Работа выполнена в рамках инновационного молодёжного проекта УрО РАН №9-М и гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских учёных - кандидатов наук МК -2716.2010.8.*

1. Ничипурук А.П., Сташков А.Н., Костин В.Н., Корх М.К., Дефектоскопия, № 9 (2009)
2. Ничипурук А.П., Розенфельд Е.В., ФММ, т. 84, вып. 6 (1997)

# **ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ**



## ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ РАСТВОРА ЭТАН-АЗОТ

*Андбаева В.Н.\**, Хотиенкова М.Н.

Институт теплофизики Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: andbaeva@mail.ru

Отсутствие информации о свойствах метастабильных жидкостей, отклоняющихся от своих равновесных значений, может приводить к ошибкам при проведении технологических процессов. Трудно представить себе природный или технологический процесс, в котором система не содержит примесей, в частности, растворенных газов, а добавление в систему даже малого количества ещё одного компонента может существенным образом изменить ее свойства. В связи с этим, широкомасштабное использование сжиженного природного газа в промышленном производстве предполагает комплексные изучения его теплофизических свойств и получение надёжных результатов по ним.

В работе представлены результаты измерения капиллярной постоянной  $a^2$  раствора этан–азот (основных компонентов природного газа). Измерения выполнены методом капиллярного поднятия [1]. Опыты проводились с газами высокой чистоты. Паспортная чистота азота составляла 99.999 %, этана – 99.70 %. В интервале температур 90 – 200°K измерения проведены по шести изотермам при давлениях до 4 МПа.

Получено, что с повышением температуры (при заданном составе раствора) и увеличением концентрации азота (при заданной температуре) капиллярная постоянная раствора этан–азот уменьшается. Изотермы концентрационной и барической зависимостей капиллярной постоянной слабо выпуклы к оси абсцисс.

Для построения уравнения состояния раствора этан–азот использовалась модель, предложенная Леммоном и Якобсеном [2]. В рамках этой модели могут быть рассчитаны термодинамические параметры как жидкой, так и паровой фаз бинарного раствора. Расчёт базируется на одножидкостной модели раствора, законе соответственных состояний и строится относительно свободной энергии Гельмгольца для смеси. Уравнения состояния чистых этана и азота представлены в виде двойного разложения коэффициента сжимаемости в ряд по степеням температуры и плотности. По полученному уравнению рассчитаны значения давления насыщения, ортобарических плотностей и поверхностного натяжения раствора этан–азот. Результаты измерения капиллярной постоянной и значения поверхностного натяжения аппроксимированы аналитическими зависимостями от температуры и концентрации.

*Работа выполнена в рамках договора с Правительством Свердловской области № РФ-8, программы совместных научных исследований УрО – СО РАН (проект № 09-С-2-1007), при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-96043 и 09-08-00176).*

1. Байдаков В.Г., Межфазная граница простых классических и квантовых жидкостей, УИФ «Наука» (1994)
2. Lemmon E.W., Jacobsen R.T., Int. J. of Thermophys, **20**, 825 (1999)

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ И ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ В РАСТВОРАХ: ЦИРКУЛЯЦИОННЫЙ НАСОС

*Арефин С.В.*<sup>1,2\*</sup>

<sup>1</sup>Уральский Государственный университет им. А.М. Горького, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт теплофизики УрО РАН, г.Екатеринбург, Россия

\*E-mail: foxik@k66.ru

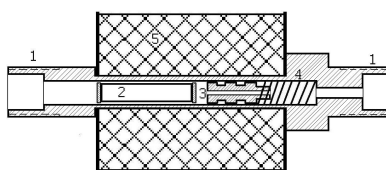


Рис. 1. Циркуляционный насос. 1 – латунный цилиндр, 2 – железный стержень, 3 – тефлоновый поршень, 4 – пружина, 5 – катушка.

Важными теплофизическими параметрами являются давление фазового равновесия и поверхностное натяжение. Поверхностное натяжение измеряется с помощью капиллярного метода. Для исследования фазового равновесия применяются статический или циркуляционный методы. Нами разработана экспериментальная установка, которая будет использоваться как для исследования параметров фазового равновесия, так и для измерения поверхностного натяжения. В установке реализуется циркуляционный метод. Один из узлов установки – циркуляционный насос [1].

Идея циркуляционного метода состоит в том, что исследуемый раствор помещается в закрытый сосуд и интенсивно перемешивается путём циркуляции пара через жидкость. После установления равновесия циркуляция прекращается, и извлекаются пробы пара и жидкости для анализа. Циркуляционный метод считается наиболее точным, так как перемешивание компонентов происходит во всем объёме жидкости.

Циркуляционный насос изображён на Рис.1. Насос представляет собой латунный цилиндр 1. Цилиндр имеет отверстие диаметром 7 мм, переходящий в 2.5 мм. Центральная часть цилиндра имеет уменьшенную толщину стенки, на которой находится катушка 5 с проволокой диаметром 1.3 мм и числом витков 650. Утоньшение стенки нужно для уменьшения потерь энергии магнитного поля и, тем самым, для увеличения втягивающей силы соленоида 2. Внутри цилиндра находятся железный стержень 2, тефлоновый поршень 3 и пружина 4. Поршень диаметром 7 мм имеет сквозное отверстие диаметром 1.5 мм. Железный стержень имеет диаметр 6.5 мм.

Принцип работы насоса следующий. Подавая напряжение на обмотку соленоида, мы получаем электромагнитную силу, затягивающую железный стержень вглубь латунного цилиндра. Железный стержень поджимает тефлоновый поршень, закрывая отверстие в нем, тем самым не давая газу проникнуть из правой полости латунного цилиндра в левую, и двигает тефлоновый поршень вглубь. Газу не остаётся другого пути, как пойти по капилляру в ячейку. Сняв напряжение с обкладок соленоида, мы убираем втягивающую электромагнитную силу, и оба стерженька под действием силы упругости пружины устремляются из глубины латунного цилиндра. Отверстие в тефлоновом стержне не поджато, поэтому газ свободно проникает из левой полости в правую. Регулируя времена подачи напряжения на обкладку соленоида, мы регулируем частоту циркуляции газа. Регулируя величину напряжения на обкладке, мы количественно регулируем порцию газа, проходящую через капилляр.

Электрическая схема для циркуляционного насоса представляет собой мультивибратор, выполненный на основе микросхемы NE555.

*Работа выполнена в рамках договора с Правительством Свердловской области № РФ-8, при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-96043 и 09-08-00176)*

1. Street W.B. and Erickson A.L., Phase Equilibria in gas mixtures at high pressures: implications for planetary structures, *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **5**, 357-366 (1972)



**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ВЕЩЕСТВ  
С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ***Богатищева Н.С.*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Bogatishcheva@mail.ru

С помощью искусственных нейронных сетей были определены критическая температура и критическое давление пяти гомологических рядов с общей формулой  $H(CH_2)_R$ , где  $R$  – различные концевые группы: *n*-алканов, 1-алканолов, 1-алкенов, алканольных кислот и *n*-алкилбензолов. Экспериментальные данные известны лишь для первых нескольких членов исследуемых нами гомологических рядов. Химические соединения с более высокой молекулярной массой являются термически нестабильными, т.е. их термическое разложение начинается при температурах ниже критической, что осложняет измерение их критических свойств. Интерес к определению критических констант термонестабильных соединений вызван потребностями практики: они требуются для построения уравнения состояния как самих веществ, так и их смесей, используются для расчёта других теплофизических свойств химических соединений. Для расчёта критических свойств в основном применяются методы группового вклада и различные способы экстраполяции экспериментальных данных, полученных для начальных членов гомологического ряда, на последующие члены. В настоящей работе для определения критических параметров была выбрана двухслойная сеть с прямой передачей сигнала. Такая сеть может воспроизвести с произвольной точностью любую непрерывную функцию многих переменных, если задать достаточное количество нейронов скрытого слоя.

Для аппроксимации критической температуры использовали двухслойную нейронную сеть с тремя сигмоидными нейронами скрытого слоя и одним линейным нейроном выходного слоя. Обучение производили, используя алгоритм оптимизации Левенберга-Маркарта с байесовской регуляризацией. Для аппроксимации критического давления был выбран перцептрон с гиперболическими тангенциальными функциями активации в каждом слое. При этом использовали функцию обучения сети, которая модифицирует значения весов и смещений по методу градиентного спуска. Расчёты были проведены с помощью математического пакета Matlab 6.0.

С помощью нейронных сетей также было рассмотрено предельное поведение критических свойств веществ, состоящих из цепных молекул, когда число звеньев в молекуле стремится к бесконечности: было установлено, что при  $n \rightarrow \infty$  температура имеет конечное значение, критическое давление стремится к нулю.

Результаты расчётов сравнивались с данными, полученными с помощью ранее разработанных методов определения критических свойств веществ, состоящих из цепных молекул [1,2]. Сравнение средних квадратичных отклонений и анализ поведения критических констант при  $n \rightarrow \infty$  позволили сделать вывод, что нейронные сети могут быть успешно использованы для определения критических констант веществ с небольшим числом атомов углерода в молекуле, для более далёкой экстраполяции рекомендуется использовать метод функциональной автоматодельности [1].

Основным недостатком использования нейронных сетей для решения задач экстраполяции критических свойств веществ является отсутствие достаточного количества экспериментальных данных, необходимых для обучения нейронной сети, что делает метод неприменимым для большого числа химических соединений.

*Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских учёных (№МК-3269.2009.8).*

1. Nikitin E.D., Pavlov P.A., Bogatishcheva N.S., Fluid Phase Equilib., **235**, 1 (2005)
2. Богатищева Н.С., Никитин Е.Д., Теплофизика Высоких Температур, **43**, 2, 196 (2005)

## ДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТРУЙ ПЕРЕГРЕТОЙ ВОДЫ

*Бусов К.А.\* , Решетников А.В., Мажейко Н.А.*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kbusov@mail.ru

В современном энергетическом оборудовании используются теплоносители с рабочими параметрами (температурой, давлением), близкими к критической точке. При аварийных ситуациях с образованием течи в тракте теплоносителя могут реализоваться условия взрывного парообразования на центрах флуктуационной природы [1]. Реализация взрывного вскипания в потоке может привести к особенностям в поведении характеристик потока (расход, реактивная отдача струи).

Измерения реактивной отдачи струй были проведены на лабораторной установке кратковременного действия, обеспечивающей стационарный режим истечения в атмосферу в течение нескольких десятков секунд. Рабочий цилиндрический канал с острыми входными кромками имел длину  $l=0.7$  мм и диаметр  $d=0.5$  мм.

В опытах наблюдались и фотографировались формы струй перегретой воды. Были выделены несколько видов форм струи, соответствующих различным механизмам разрушений струи.

Для интервала температур от  $T_{0s}=220$  °С до  $T_{0s}=300$  °С зафиксирован полный развал струи – угол раскрытия конуса струи  $\alpha=1800$  и определяется геометрией прижимного фланца. Для органических жидкостей (н-пентан, н-гексан, фреон) полный развал струи наблюдался при температурах  $T_0 \geq 0.9T_C$  и обусловлен интенсивным парообразованием на центрах гомогенной природы. В опытах с водой полный развал был обнаружен при приведённых температурах  $T/T_C$  от 0.75 до 0.90. Согласно экспериментальным данным вода проявляет на практике необычайно высокую интенсивность гетерогенного зародышеобразования в отмеченном температурном интервале. Частоты активации гетерогенных центров обеспечивают интенсивное объёмное вскипание, которое происходит за выходным срезом канала. При этом струя приобретает форму полого конуса с углом при вершине (угол распыла)  $\alpha \geq 120^\circ$ . Такая форма струи становится неустойчивой при наличии стенки, перпендикулярной оси струи (роль стенки выполнял прижимной фланец), и струя примыкает к плоскости фланца в соответствии с эффектом Коанда.

Для возможного устранения кризисного поведения струй перегретой воды была изменена кинетика парообразования в среде, за счёт добавления к воде низкокипящего (этанол) или высококипящего (глицерин) компонентов [2]. Кризисные явления в водном растворе этанола смещались в сторону более низких температур. Кризисный режим истечения для воды, имеющей высококипящий компонент (глицерин 20%), наблюдался при более высокой температуре ( $T=240$  °С), чем для чистой воды.

Изучение реактивной отдачи струй перегретых жидкостей (вода, фреон, водные растворы), при истечении их из рабочей камеры высокого давления, через короткий цилиндрический канал в атмосферу, позволило наблюдать резкое снижение (кризис) реактивной тяги. Кризис реактивной тяги сопровождался полным раскрытием струи, которое было обусловлено как интенсивным объёмным флуктуационным парообразованием (взрывное вскипание), так и наличием плоскости перпендикулярной оси струи за выходным срезом канала.

1. Скрипов В.П., Метастабильная жидкость, Наука (1972).
2. Решетников А.В., Мажейко Н.А., Виноградов А.В., Бусов К.А., Коверда В.П., Динамические характеристики вскипающих струй перегретых водных растворов, Теплоэнергетика, **8**, 68-74 (2010)

## СОПОСТАВЛЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЖИДКОСТЕЙ В РЕЖИМЕ РЕАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ

*Волосников Д.В.\**, *Смотрицкий А.А.*, *Старостин А.А.*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: dima\_volosnikov@mail.ru

Анализ качества нефтепродуктов, вновь синтезируемых соединений на их основе и практически важных технологических жидкостей не возможен без применения современных средств контроля качества. Проверка произведённых жидкостей на соответствие ГОСТу проводится по нескольким десяткам параметров, что вызывает как финансовые, так и временные издержки. На практике при перевозке, хранении и использовании значительных партий жидких веществ, таких как масла и топлива, гарантия качества продукта не может быть обеспечена лишь целостностью упаковки. В некоторых случаях могут ухудшаться не только эксплуатационные свойства, но и само использование дорогостоящих нефтепродуктов может приводить к аварийным ситуациям. Обезопасить такие жизненно важные секторы реальной экономики, как энергетика и автотранспорт возможно при внедрении современных средств контроля качества жидких сред, в том числе их текущего состояния. Основные требования к таким средствам контроля (устройствам) можно сформулировать следующим образом:

- чувствительность к наличию предельных концентраций опасных компонентов;
- высокое быстродействие;
- простота и безопасность в применении;
- компактность;
- низкая стоимость как самого устройства, так и единичного измерения.

В Институте теплофизики УрО РАН был разработан метод для изучения кинетики вскипания жидких сред при их ударном нагреве [1]. Позднее, благодаря развитию техники и электроники, данная работа получила новое дыхание, в частности был разработан метод управляемого импульсного нагрева миниатюрного проволочного зонда [2, 3]. Метод является высокочувствительным и позволяет регистрировать малые изменения в тепловом отклике перегреваемой среды. На базе этого метода разработан способ детектирования легколетучих компонентов опасных для маслonaполненного оборудования [4]. В настоящий момент, создано автоматизированное устройство, наиболее удовлетворяющее перечисленным выше требованиям. Для автоматизации процесса была разработана схема импульсного нагрева, определены величины температурно-временных характеристик, подобраны массогабаритные размеры чувствительного элемента (длина и начальное сопротивление проволочного зонда).

Настоящий доклад, является логическим продолжением работы [5] и подразумевает обсуждение принципа действия устройства и его апробации при анализе качества не только масел, но и топлив для наземного и воздушного транспорта в режиме реального времени. В дальнейшем предполагается использовать имеющиеся наработки для разработки устройства экспресс-контроля качества гидравлических жидкостей.

*Работа выполнена при поддержке Уральского отделения РАН (молодёжный инновационный проект «Автоматизированное переносное устройство экспресс-контроля качества топлива») и РФФИ (проект № 10-08-00538\_а).*

1. Павлов П.А., Динамика вскипания сильно перегретых жидкостей. Свердловск: УрО АН СССР (1988)
2. Скрипов П.В., Старостин А.А., Волосников Д.В., ДАН, **390**, 2, 192 (2003)
3. Васильев С.Н., Волосников Д.В., Скрипов П.В. и др., ПТЭ, **4**, 130 (2004)
4. Волосников Д.В., Скрипов П.В., Вестник ТГТУ, **14**, 1, 61 (2008)
5. Волосников Д.В., Смотрицкий А.А., СПФКС-9, 58 (2008)

## ИЗМЕРЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРОПРОВОДНОСТИ ШАРООБРАЗНЫХ И ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ ИМПУЛЬСНЫМ МЕТОДОМ

*Каракулов О.Е., Загребин Л.Д.*

Ижевский государственный технический университет, г. Ижевск, Россия

E-mail: slokam@mail.ru

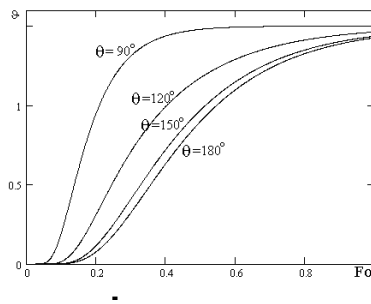


Рис. 1. Зависимость относительной избыточной температуры от критерия  $Fo$  для различных точек поверхности шара без учета теплообмена

Измерение теплофизических свойств металлов и сплавов при высоких температурах в окрестности температуры плавления является актуальной задачей. Метод температурных волн, применяющийся при подобных исследованиях, подробно изложен в работе [1]. Он отличается высокими точностными характеристиками, однако при измерении теплопроводности металлов и сплавов при высоких температурах возможно применение и импульсного метода, отличающегося относительной простотой реализации экспериментальной установки. Так при малом размере образца его форму можно аппроксимировать шаром и использовать метод измерения, изложенный в работе [2]. Коэффициент теплопроводности можно определить по формуле  $\alpha = Fo_{1/2} \frac{R^2}{t_{1/2}}$ , где  $Fo_{1/2}$  находится из

рисунка, и соответствует половине максимального значения относительной температуры;  $R$  – радиус образца;  $t_{1/2}$

– время, за которое экспериментальный температурный сигнал достигает половины максимального значения. Часто при измерении теплофизических свойств веществ используются образцы сравнительно больших размеров. При этом более удобным является образец в форме цилиндра. Так в работе [3] рассматривается импульсный метод измерения, при котором тепловой импульс подается на торец цилиндрического контейнера, содержащего исследуемый расплав, а температурный сигнал снимается с противоположного основания цилиндра, что предъявляет особые требования к материалу контейнера. Нами рассматривается методика, при которой тепловой импульс подается на переднюю поверхность вертикально расположенного цилиндрического образца, и с нее же снимается температурный сигнал. Теплопроводность определяется по времени достижения температурным сигналом максимального значения.

1. Ивлиев А.Д., Метод температурных волн в теплофизических исследованиях (анализ советского и российского опыта), Теплофизика высоких температур, **47**, 5, 771-792 (2009)
2. Каракулов О.Е., Загребин Л.Д., Шабанова И.Н., Измерение теплопроводности образцов в виде шара. Система Fe-Sn, ТВТ, **48**, 3, 368-372 (2010)
3. Katsuhiko Yamamoto, Toshio Abe and Shin-ichiro Takasu, Thermal diffusivity of crystalline and liquid silicone and an anomaly of melting, Jap. J of Appl. Phys., **30**, 10, 2423–2426 (1991)

**ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ  
НА ОСНОВЕ НИОБАТОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ  
И ЦИРКОНАТА-ТИТАНА СВИНЦА**

Омаров З.М.<sup>1</sup>, Абдуллаев Х.Х.<sup>1</sup>, Кравченко О.Ю.<sup>2\*</sup>, Андриюшин К.П.<sup>2</sup>, Андриюшина И.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики ДНЦ РАН, г. Махачкала, Россия

<sup>2</sup>НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: olukrav@mail.ru

Основу большинства сегнетоэлектрических материалов, серийно освоенных мировой практикой, составляют многокомпонентные системы свинецсодержащих сложных оксидов на базе цирконата-титаната свинца (ЦТС). Экологические требования, предъявляемые к пьезокерамикам, делают необходимым исключение чрезвычайно токсичного элемента - свинца из технологического процесса. Однако, в связи с тем, что в бессвинцовых материалах пока не удалось достигнуть электрофизических параметров, близких к ЦТС-составам, актуальным является продолжение исследований широкого спектра промышленных материалов, включающих их теплофизические свойства.

Нами получена группа бессвинцовых керамических материалов на основе ниобатов щелочных металлов, в том числе, промышленные материалы ПКР-35 и ПКР-61 с уникальными электрофизическими свойствами, не реализуемыми в ЦТС-составах, а также материалов на базе ЦТС: сегнетомягкие (ПКР-73, ПКР-7М, ПКР-7, ПКР-66), сегнетожесткие (ПКР-8, ПКР-78), высокочувствительные (ЦТСНВ-19, ПКР-1, ПКР-37, ЦТС-19). В данной работе представлены результаты исследований комплекса теплофизических свойств (теплопроводности,  $\lambda$ , коэффициента теплового линейного расширения,  $\alpha$ , изобарной теплоёмкости,  $C_p$ ) всех названных материалов, в том числе, стехиометрических и нестехиометрических ниобатов натрия и серебра, полученных по обычной керамической технологии и методом горячего прессования.

Измерения  $\lambda$ ,  $\alpha$ ,  $C_p$  выполнены на дифференциальном сканирующем калориметре DSC 204 фирмы Netzsch, установке, совмещающей ёмкостной и дилатометрический методы, специальной установке абсолютным компенсационным методом, соответственно.

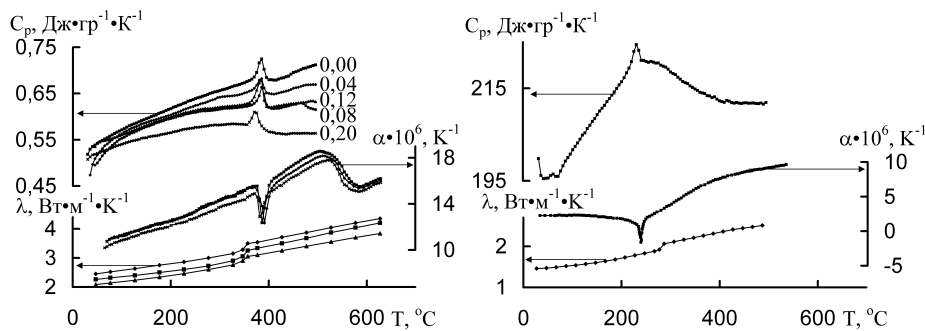


Рис. 1.

В качестве иллюстраций приведены зависимости теплофизических параметров от температуры керамик ниобата натрия состава  $\text{Na}_{1-x}\text{NbO}_{3-x/2}$  ( $x=0,00; 0,04; 0,08; 0,12; 0,20$ ) (рис. 1 а) и ПКР-7 (рис. 1 б). Установленные аномалии хорошо согласуются с наличием в исследуемых интервалах температур симметричных фазовых переходов (из сегнето- в параэлектрическое состояние).

Наблюдаемые эффекты целесообразно учитывать при разработке функциональных сегнето-пьезокерамических материалов и устройств на их основе.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 08-02-01013.*

## ХАРАКТЕРИСТИКА ИЗЛУЧЕНИЯ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

*Кутергина Н.А.*

Вятский государственный университет, г. Киров, Россия

\*E-mail: bagira\_nat@pochta.ru

При работе промышленных и энергетических установок в продуктах сгорания топлива содержится большое количество частиц несгоревшего топлива и золы, которые необходимо нейтрализовать в котлах-утилизаторах. Для этого необходим качественный расчёт теплообмена внутри энергетических установок, что позволит тщательно изучать различные характеристики получаемых в продуктах сгорания частиц.

Целью данной работы является комплексное расчётное исследование радиационных характеристик (спектральные и интегральные сечения и коэффициенты поглощения, ослабления, рассеяния и индикатриса рассеяния) и характеристик излучения (интенсивность и спектральные и интегральные плотности потоков и степень черноты) моно- и полидисперсных систем частиц ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) энергетических установок. Представление результатов комплексных расчётов в удобном для интерпретации виде (в графической и табличной форме).

Для этого использовалось специальное программное обеспечение, которое позволяет рассчитывать характеристики излучения дисперсных систем и гетерогенных продуктов сгорания, радиационные характеристики единичных частиц и радиационные характеристики единичного объёма.

Наиболее важный исходный параметр – комплексный показатель преломления  $m = n_1 - n_2 \cdot i$ , где  $n_1$  – показатель преломления,  $n_2$  – показатель поглощения частиц конденсированной фазы продуктов сгорания.

Исходными данными являлись: плотность пыли  $\rho$ , средний по удельной поверхности диаметр  $d_{\text{ср}}$ , химический состав по массе (в %-ном соотношении), толщина слоя  $L = 80$  мм, массовая доля  $Z$ , молярная масса  $\mu$ , концентрации частиц, давление  $P$ , температура  $T$  и т.п. При расчёте характеристик учитывалась газовая фаза. Также расчёты проводились при разных температурах ( $T = 850$  К,  $2300$  К). Спектральный диапазон  $\lambda = 1 \dots 5$  мкм,  $\Delta\lambda = 0.1$  мкм. Исходные данные для поставленных задач взяты в [1] и [2].

Проводились исследования для различных систем частиц продуктов сгорания промышленных и энергетических установок, таких как:

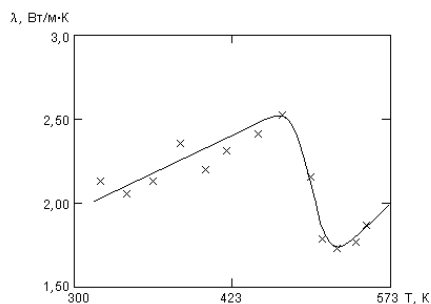
- 1)  $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_2\text{O}_3$  (Котёл БКЗ-210-140, Зола кузнецкого угля).
- 2)  $\text{SiO}_2 - \text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{Al}_2\text{O}_3$  (Котёл ТОП-35/40).
- 3)  $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$  (Котёл УЭЧМ-67).

По результатам расчётов были построены графические зависимости характеристик излучения от длины волны, температуры, состава. Также были сделаны следующие выводы: по результатам расчётов можно установить области наибольшего влияния определяющих параметров продуктов сгорания на характеристики излучения в промышленных и энергетических установках для их либо корректного учёта или их пренебрежения. При наличии частиц селективность излучения продуктов сгорания проявляется в области наибольшего влияния газовой фазы (т.е. при длинах волн  $\lambda = 2.7 - 4.3$  мкм). Для полос излучения газовой фазы наблюдается сплошное излучение. На основании этого можно качественно и количественно планировать, прогнозировать и интерпретировать физический эксперимент по исследованию радиационных характеристик и характеристик излучения моно- и полидисперсных систем частиц.

1. Гильфанов Р.Г., Кандидатская диссертация на тему: Экспериментальное исследование эмиссионных свойств твёрдых дисперсных фаз в аэродинамическом потоке энерготехнологических агрегатов, Казань (2008)
2. Кузьмин В.А., Тепловое излучение в двигателях и энергетических установках, Киров: ООО «Фирма «Полекс» (2004)

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОКОМПОЗИТА ЖЕЛЕЗА  $\alpha$ -Fe+Am(Fe-C)Мухаметшина И.Ю.<sup>1\*</sup>, Ульянов А.Л.<sup>2</sup>, Загребин Л.Д.<sup>2</sup><sup>1</sup>Ижевский государственный технический университет, г. Ижевск, Россия<sup>2</sup>Физико-технический институт, г. Ижевск, Россия

\*E-mail: fizika@istu.ru

Рис. 1. Приводится изменение  $\lambda$  от  $T$ 

Растворение фаз при деформации приводит к декадансу физико - механических свойств сплавов. Наиболее интенсивное деформационное воздействие реализуется при механической активации в высокоэнергетических шаровых мельницах [1]. При этом наноструктурное состояние возникает в металлических материалах с предельно малой величиной размера зерна.

Образцы были приготовлены следующим образом. В качестве исходного состояния был взят механически сплавленный порошок Fe(95)C(5) в атомных %С, который после отжига 500°С (1ч.) имел субмикроструктурную структуру перлита с содержанием в нем цементита 20 ат.%. После

механического измельчения в атмосфере аргона в шаровой планетарной мельнице Frisch P-7 с энергонапряжённостью 2,0 Вт/г в течении 16 ч., образцы представляли собой нанокompозит  $\alpha$ -Fe+Am (Fe-C).

Измерение коэффициента теплопроводности ( $\lambda$ ) проводили на приборе ИТ –  $\lambda$  – 400.

Результаты измерения  $\lambda$  показывает, что коэффициент теплопроводности от 300 до 400 К возрастает, а затем спадает до температуры Кюри составляет  $T_C = 520$  К, ошибка измерений составляет 10%.

1. Tao N.R., Wang Z.B., Tong W.P. et. al., Acta Mater., **50**, 4603 (2002)
2. Дорофеев Г.А., Елсуков Е.П., Ульянов А.Л., Деформационно-индуцированные структурно-фазовые превращения в нанокompозитах железо-цементит, Известия РАН, Серия физическая, **69**, 1465-1469 (2005)

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ КОНВЕКЦИИ ЖИДКОСТИ В ВЫСОКОЧАСТОТНОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

*Нагаев Ф.А.\**, *Фатыхов М.А.*

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

\*fanfan185@rambler.ru

Рассмотрим термогравитационную конвекцию несжимаемой диэлектрической жидкости внутри цилиндра радиуса  $R$  и высотой  $H$  в высокочастотном электромагнитном поле напряжённостью  $E$ . Физической основой этого эффекта является формирование в жидкости неоднородного поля температуры. В гравитационном поле это приводит к возникновению архимедовых сил.

Для решения данной задачи создаётся модель цилиндра с находящейся в ней жидкостью с использованием мощной интерактивной среды для моделирования физических объектов, явлений и процессов Comsol Multiphysics. В качестве рассматриваемой жидкости берём воду.

Создаём модель:

Навигатор моделей

1. Открываем Model Navigator.
2. Выбираем в списке Space Dimension 3D.
3. Нажимаем кнопку Multiphysics.
4. В списке Application Modes выбираем режим Heat Transfer Module > General Heat Transfer > Transient analysis и нажимаем кнопку Add. Управляющим уравнением для этого режима является уравнение теплопроводности:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(-k \nabla T) = Q + q_s T$$

5. Из списка Application Modes выбираем режим COMSOL Multiphysics > Fluid Dynamics > Incompressible Navier-Stokes > Transient analysis и нажимаем кнопку Add. Управляющим уравнением для этого режима является уравнение Навье-Стокса:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla[-p\mathbf{I} + \eta(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)] + \mathbf{F}$$

6. В меню Options>Constants задаем значения ускорения свободного падения и атмосферного давления:  $g=9.80665 \text{ м/с}^2$ ,  $p_{\text{атм}}=101325 \text{ Па}$ .
7. В меню Options>Expressions>Scalar Expressions вводим значения следующих переменных: плотность воды, коэффициент теплопроводности воды, теплоемкость воды и динамическая вязкость воды:  $\rho = 1000 \text{ кг/м}^3$ ,  $\lambda = 0.599 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ ,  $C_p = 4200 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$ ,  $\eta = 1.002 \text{ кг/м}\cdot\text{с}$ . Далее задаем геометрию цилиндра, настраиваем подобласти стенок цилиндра и жидкости находящейся в ней, задаем начальные и граничные условия. После задания всех параметров генерируем сетку командой Mesh >Initialize Mesh и запускаем решение командой Solve. Решение проводится для жидкости которая покоится в цилиндре и для жидкости которая движется (с учётом параболического распределения скорости движения жидкости в цилиндре).

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Теоретическая физика: Учебное пособие. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. -3-е изд., перераб. М.: Наука
2. Егоров В.И., Применение ЭВМ для решения задач теплопроводности, Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики (2006)



## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВОГО РАЗДЕЛЕНИЯ В РАССЛАИВАЮЩИХСЯ РАСТВОРАХ

Петров С.И.\*, Гильдин Е.Ю.

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Sega\_87@inbox.ru

Изучение центров зародышеобразования на расслаивающихся растворах является актуальной научно-технической задачей. Одним из способов изучения зародышеобразования и последующей стадии коалесценции зародышей является визуальное наблюдение за процессами, происходящими около критической точки расслаивающихся растворов.

В наши задачи входило проектирование и сборка экспериментальной установки, позволяющей визуально наблюдать за процессами расслоения и последующим ростом закритических зародышей.

В качестве исследуемой системы была выбрана система лутидин–вода. Её преимуществами перед другими расслаивающимися системами является удобная для эксперимента критическая температура (307.01 К) [1] и тот факт, что критическая точка для этой системы является нижней [2].

Экспериментальная ячейка объёмом 1 см<sup>3</sup> изготовлена из латуни и с двух сторон снабжена стёклами для наблюдения. В качестве уплотнителя используется тефлоновая плёнка. Ячейка помещается в термостат, который представляет собой стеклянную ёмкость объёмом 4 литра, помещённую в теплоизолирующий пенопластовый кожух, покрытый снаружи фольгой для отражения света. В кожухе сделаны два отверстия, расположенные друг напротив друга. Внутри термостата помещается медный змеевик, по которому прокачивается вода из расположенного рядом термостата «Julabo SE 6». Для предотвращения возникновения градиентов температур в термостат помещается электрическая мешалка, представляющая собой ось двигателя с лопастью на конце.

Измерение температуры производится платиновым термометром сопротивления ПТС-10 с погрешностью 0.03 К. Термометр включается в потенциометрическую схему, состоящую из источника постоянного тока ПЗ6-1, магазина сопротивлений МСР-63 класса точности 0.05, эталонного сопротивления Р-331 класса точности 0.01 и мультиметра «Agilent 34420А».

Наблюдения можно производить стереомикроскопом «Альтами СМ-Т II» с кратностью увеличения от 5х до 97.5х. Микроскоп снабжён цифровой фотокамерой, позволяющей получать фотоизображения процесса в высоком разрешении. Наблюдения могут проводиться как в проходящем, так и в отражённом свете.

*Работа выполнена в рамках программы совместных научных исследований УрО и ДВО РАН (проект № 09-с-2-1001), договора с Правительством Свердловской области № РФ-8 при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-96043 и 09-08-00176).*

1. Лаптева М, Колпаков Ю.Д., Пожарская Г.И., Тепловые процессы и метастабильные состояния, **36** (1990)
2. Веденов А.А., Физика растворов, М.: Наука, **112** (1984)

## РАЗРАБОТКА УСТРОЙСТВА БЕСКОНТАКТНОГО ЭКСПРЕСС-КОНТРОЛЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ПРОМЫШЛЕННОМ СИНТЕЗЕ

Волосников Д.В., Смотрницкий А.А.\*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: smotrnickiy@bk.ru

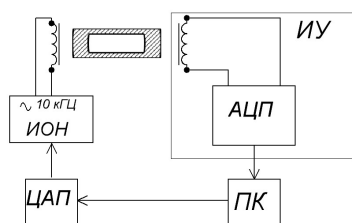


Рис. 1. Блок-схема бесконтактного измерителя электропроводности. Обозначения: ИОН – источник опорного напряжения, ИУ – измерительное устройство, ЦАП – цифро-аналоговый преобразователь, АЦП – аналого-цифровой преобразователь, ПК – компьютер.

Существует проблема перевода процесса получения новых материалов из химических лабораторий в производственную сферу. Ключевым условием успешного решения данной задачи является разработка удобных методов контроля химического превращения. Несмотря на многообразие лабораторных методов контроля химических реакций, немногие из них нашли применение непосредственно в технологических установках. На сегодняшний день не найден универсальный косвенный метод экспресс-контроля. Поэтому для решения данной задачи в дополнение к методам импульсного теплового тестирования [1,2] развивается бесконтактный метод импульсного контроля проводимости среды.

Принцип действия устройства, разрабатываемого на основе метода, заключается в индукционном измерении сопротивления витка анализируемой жидкости. Проблема химической стойкости датчиков снимается бесконтактным исполнением разрабатываемого прибора. Генерирующая часть прибора состоит из источника опорного напряжения (ИОН), создающего через питающие сердечник и обмотку эталонное напряжение в жидкостном витке, пропорциональное электропроводности измеряемой жидкости. Измерительная часть состоит из собственно измерительного устройства (ИУ), образованного сердечником и обмоткой, а также компактным аналого-цифровым преобразователем (АЦП).

Амплитуда напряжения в жидкостном витке регулируется управляющим ЦАПом в зависимости от измеренной электропроводности жидкости в диапазоне 0.05-5В. Такое решение позволило удерживать погрешность измерений на уровне 0.05% в диапазоне изменения электропроводности от 5 мкСм/см до 1 См/см. Проведены измерения электропроводности модельных систем – водных растворов солей KCl, NaCl, CaCl.

1. Skripov P.V., Smotrnickiy A.A., Starostin A.A., Engineering Thermophysics, **16**, 155 (2007)
2. Волосников Д.В., Скрипов П.В., Старостин А.А., Приборы и техника эксперимента, **1**, 146 (2000)

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФОРМАЛИЗМА СРЕДНЕГО ВРЕМЕНИ ПЕРВОГО ПЕРЕХОДА ПРИ ИЗУЧЕНИИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПЕРЕОХЛАЖДЁННОЙ ЖИДКОСТИ

*Тупеев А.О.\**, *Тетерин А.С.*

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: tipeeff@itp.uran.ru

Компьютерное моделирование играет важную роль при изучении гомогенной нуклеации и позволяет проверить классическую теорию гомогенного зародышеобразования. Кроме того, оно дает подробную микроскопическую информацию о начальной стадии фазового перехода.

В данной работе для изучения кристаллизации переохлаждённой леннард-джонсовской жидкости мы использовали метод среднего времени первого перехода (mean first-passage time (MFPT)), который позволяет определить частоту зародышеобразования, размер критического зародыша, фактор Зельдовича.

Исследуемые модели содержали 2048 и 8788 частиц, помещённых в кубическую ячейку с периодическими граничными условиями. Параметры потенциала Леннарда-Джонса  $\sigma = 0.3405$  нм,  $\epsilon/k_B = 119.8$  К (параметры аргона), где  $k_B$  - постоянная Больцмана. Значения  $\sigma, \epsilon, k_B$  и масса частицы  $m = 6.6336 \times 10^{-26}$  кг использовались в качестве параметров обезразмеривания термодинамических величин. Расчёты проводились в  $NVE$  ансамбле. При интегрировании уравнений движения использовался алгоритм Бимона. Шаг интегрирования уравнений по времени  $\tau = 5 \times 10^{-15}$  с. Радиус обрезания потенциала межчастичного взаимодействия  $r_C = 6.3\sigma$ . Вычисления велись на кластерах Института математики и механики УрО РАН и в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН (г. Москва).

В процессе интегрирования уравнений движения рассчитывались давление, температура, внутренняя энергия, а также через каждые 100 временных шагов записывались координаты всех частиц. Вычисления проведены при одной приведённой температуре  $T^* = 0.55$ . Требуемая температура задавалась коррекцией скоростей частиц. Расчёты начаты из стабильной области. Исходная конфигурация частиц в ячейке – случайное равномерное распределение. Заход в метастабильную (пересжатую) область осуществлялся уменьшением объёма ячейки (повышением плотности частиц). Для каждой исследуемой модели получено 200 независимых конфигураций.

Для выделения кристаллического зародыша мы использовали метод, разработанный Френкелем с сотрудниками и основанный на анализе упорядочения связей Стейнхарда. Установлено, что моменты появления в системе закритического зародыша и понижения давления хорошо коррелируют.

На основании исследования эволюций максимальных зародышей во времени для каждой конфигурации построена функция среднего времени ожидания  $\tau(n)$  кристаллика размера  $n$ . В формализме MFPT данная функция определяется формулой:  $\tau(n) = \bar{\tau} \{1 + \text{erf}[Z \sqrt{\pi}(n - n_*)]\} / 2$ , где  $n_*$  - размер критического зародыша,  $Z$  - фактор Зельдовича,  $\bar{\tau}$  - среднее время ожидания критического зародыша. Определена частота нуклеации  $J = (\bar{\tau} V)^{-1}$ , размер критического кристалла  $n_*$ , фактор Зельдовича. Эти данные сопоставлялись с результатами метода среднего времени жизни. [1]

*Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект 10-08-96043) и проектом 09-П-2-1014 Программы Президиума РАН.*

1. V.G. Baidakov, A.O. Tipeev, K.S. Bobrov, and G.V. Ionov, J. Chem. Phys., **132**, 234505 (2010)

### ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ В СИСТЕМЕ ЭТАН-АЗОТ

*Хотиенкова М.Н.\**, Петров С.И., Андбаева В.Н.

Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: mary-anton@bk.ru

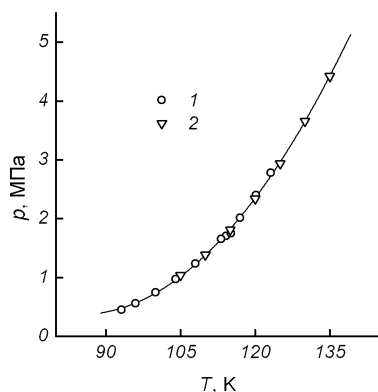


Рис. 1.  $p, T$  – диаграмма местоположения точек в трехфазной равновесной системе жидкость-жидкость-пар раствора этан-азот. 1 – наши данные; 2 – данные работы [2].

находятся в равновесии с паровой фазой. После установления равновесия в капиллярах видны сразу два мениска: один – на границе раздела двух жидкостей, а второй – на межфазной границе жидкость-пар. Значение давления расслоения при  $T = 113.15$  К хорошо согласуется с результатами работы [2]. Измерения при  $T = 93.15$  К проведены нами впервые. Наблюдаемое расслоение ограничивает сверху по давлению область измерений капиллярной постоянной раствора этан-азот. Расположение точек, соответствующих этому состоянию, показано на рис. 1. Линия, соответствующая трехфазному состоянию жидкость-жидкость-пар, начинается в конечной критической точке при температуре 133.15 К и давлении 4.171 МПа и заканчивается квадрупольной точкой 88.43 К и 0.276 МПа, в которой сосуществуют две жидкие, газообразная и твердая фазы.

*Работа выполнена в рамках договора с Правительством Свердловской области № РФ-8, программы совместных научных исследований УрО – СО РАН (проект № 09-С-2-1007), при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-96043 и 09-08-00176).*

1. Stryjek R., Chappellear P. S., Kobayashi R., J. Chem. Eng. Data., **19**, 334 (1974)
2. Massoud Gasem K.A., Hiza M.J., Kidnay A.J., Fluid Phase Equilib, **6**, 181 (1981)

В представленной работе приведены данные о фазовом расслоении бинарной системы этан-азот в интервале температур  $T = 93.15 - 113.15$  К.

Фазовое расслоение было обнаружено в ходе эксперимента по измерению капиллярной постоянной раствора этан-азот. Измерения капиллярной постоянной  $a^2$  производились дифференциальным вариантом метода капиллярного поднятия. В ходе эксперимента температура в ячейке поддерживалась автоматически и измерялась платиновым термометром сопротивления с погрешностью 0.03 К, давление – прецизионным устройством ИПДЦ класса точности 0.15, высота поднятия жидкости в капилляре – катетометром В 630 с погрешностью 0.03 мм. Концентрация азота в растворе определялась по давлению насыщения паров с использованием экспериментальных данных [1], аппроксимированных полиномом.

При измерениях капиллярной постоянной на изотерме  $T = 93.15$  К при давлении  $p > 0.450$  МПа и на изотерме  $T = 113.15$  К при давлении  $p > 1.654$  МПа в растворе образуются две несмешивающиеся жидкие фазы, которые

# **ЭЛЕКТРОФИЗИКА**



**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТИ ПРОМЕЖУТКА В SF<sub>6</sub> В УСЛОВИЯХ ИНТЕНСИВНОГО ДВИЖЕНИЯ СРЕДЫ**

Глушков Д.А.\* , Черных И.В.

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

\*E-mail: danyaGL@yandex.ru

Исследование процессов воздействия на газовый диэлектрик электрического поля (ЭП) при течении газа в сложной геометрии представляет интерес вследствие широкого использования сжатого элегаза (SF<sub>6</sub>) в качестве изолирующей среды в коммутационной технике. Движение среды приводит к неоднородному распределению давления в промежутке между электродами и образованию участков локальных уплотнений (разряжений). Анализ электрической прочности промежутка на основе стримерного механизма развития разряда [1] в газе предполагает сравнение в данной точке промежутка отношения напряжённости ЭП  $E$  к функции давления газа  $p^n$  ( $n < 1$ ) с критическим значением. Следовательно, при анализе электрической прочности необходим совместный расчет электрического и газодинамического полей.

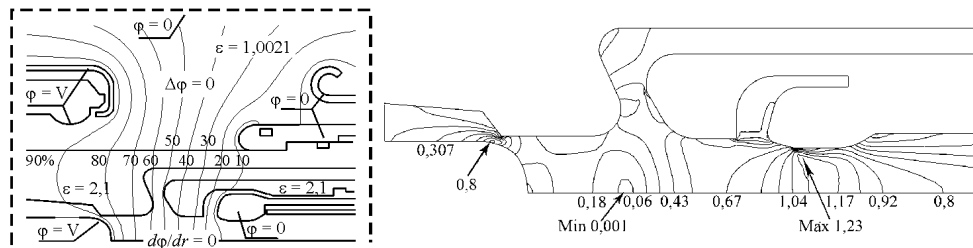


Рис. 1. Модель и результат расчёта ЭП (слева) и поля скоростей потока в отношении к местной скорости звука (справа)

При расчёте электрической прочности пренебрегалось влиянием объёмного заряда остаточного-ионизованного газа. Таким образом, модель расчёта ЭП основывается на решении в рассматриваемой области уравнения Лапласа.

Расчёт течения газа в сверхзвуковом (СЗ) режиме на основе уравнений Эйлера для сжимаемой жидкости, т.е. без учёта диссипативных механизмов, приводит к получению некорректных решений в СЗ областях течения [2]. Учёт вязкости и турбулентности делает постановку задачи корректной. В основе используемой модели лежат уравнения гидродинамики вязкой жидкости в RANS-приближении (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Течение полагалось изоэнтропийным, поэтому из уравнений сохранения массы, импульса и энергии, замыкаемых уравнением состояния, остаются первые два. Учёт турбулентного характера движения среды выполнен в рамках k-ε модели [3]. Решение задачи проводилось численно в пакете COMSOL 3.4a. Дискретизация расчётной области выполнялась по методу конечных элементов. Для решения полученной системы уравнений применялся обобщённый метод минимальных невязок (GMRES) [4].

На рис. 1 приведён пример расчёта ЭП и поля скоростей потока (в числах Маха). Совместное рассмотрение полей скоростей потока и давлений показывает, в некоторых областях течение становится СЗ. При этом происходит снижение давления и электрической прочности газа в рассматриваемой области. Проведённый расчёт позволяет выявить критические области промежутка, в которых возможно возникновение ионизационных процессов, инициирующих электрический пробой.

1. Raizer Y.P., Gas Discharge Physics, Berlin, Springer (1997)
2. Trepanier J.Y., Reggio M., Lauze Y., IEEE Trans. on Power Delivery, 6, 809 (1991)
3. Wilcox D., Turbulence modeling for CFD, DSW Industries, Inc. (1994)
4. Saad Y., Iterative methods for sparse linear systems, Philadelphia, SIAM (2000)

## ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА $TiB_2/Al_2O_3$ НА КОРУНДОВОМ ОГНЕУПОРНОМ ВЯЖУЩЕМ

*Добросмыслов С.С.\*, Резинкина О.А., Черноусов А.А.*

Сибирский федеральный университет г. Красноярск, Россия

\*E-mail: dobrosmislov.s.s@gmail.com

Электропроводящие композиты на основе диборида титана рассматриваются в настоящее время как наиболее перспективные материалы для изготовления смачиваемых алюминием катодов, использование которых не только повышает срок службы, но и улучшает режим работы алюминиевого электролизера. Однако крупнотоннажное производство катодов из диборида титана ( $TiB_2$ ) крайне ограничено из-за высокой себестоимости последнего. В связи с этим актуальной является задача сократить содержание диборида титана за счёт введения в проектируемый состав катодного материала различных наполнителей и добавок. Наиболее приемлемым для этих целей фазовым компонентом, как с точки зрения взаимодействия с жидким алюминием и насыщенным криолит-глиноземным электролитом, так и достаточно низкой стоимости, является корунд –  $\alpha - Al_2O_3$ .

Процесс получения опытных образцов состоял из следующих стадий: смешивание исходных порошков в сухом виде до однородной гомогенной смеси; смешивание полученной смеси с водой до получения пластичного и текучего раствора; вибро-литье в металлические формы с последующей выдержкой раствора в течение суток при комнатной температуре; термообработка образцов при температурах 1123-1323К. В качестве связки использовалось корундовое огнеупорное вяжущие Алкорит – 98 (98% $Al_2O_3$ , < 0.1%  $SiO_2$ , < 0.1% $Fe_2O_3$ , 1.2%CaO, размер фракции -80мкм).

Фазовый состав композитов после температурной обработки изучали методом РФА (XPERT-PRO). Морфология поверхности и структура - при помощи метода РЭМ (JEOL JSM-7001F), Физико-механические характеристики образцов – по стандартным методикам, электропроводность измерялась четырехконтактным методом.

Таблица 1. Состав и свойства композиций  $TiB_2/Al_2O_3$

№ п/п	Состав, масс. %			Плотность, кг/м <sup>3</sup>	Прочность на сжатие (обжиг 1323 К), МПа	Удельное сопротивление, Ом·м·10 <sup>-3</sup>
	$TiB_2$	Алкорит - 98	Электрокорунд			
1	30	70	–	2761	138.0	37
2	30	30	40	2687	63.0	5,6
3	40	30	30	2428	97.1	4.1

В целом проведённые исследование показали, что композиционные материалы  $TiB_2/Al_2O_3$  на корундовом огнеупорном вяжущем обладают достаточно высокими прочностными и электропроводящими свойствами, которые позволяют рассматривать их в качестве перспективных материалов для смачиваемого катода алюминиевого электролизера.

*Работа проведена в рамках выполнения проекта 2.1.2/531 по аналитической ведомственной целевой программе «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы)».*



**МАГНИТНО-ИМПУЛЬСНОЕ ПРЕССОВАНИЕ – ЭФФЕКТИВНЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ОБЪЁМНЫХ МАТЕРИАЛОВ ШИРОКОГО СПЕКТРА ПРИМЕНЕНИЙ**

Заяц С.В.

Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: seriyoga@iep.uran.ru

Одноосное магнитно-импульсное прессование (МИП) является одним из представителей динамического компактирования порошков. Прессующее усилие создается за счёт ряда преобразований энергии. Исходный электрический заряд конденсаторной батареи создаёт импульсное магнитное поле в плоском спиральном индукторе, из которого выталкивается массивный концентратор. Концентратор передаёт механическое усилие на пуансон, который непосредственно уплотняет порошок в пресс-форме. Данный метод достаточно долго развивается в лаборатории прикладной электродинамики в Институте электрофизики УрО РАН и успешно применяется для получения объёмных материалов для различных применений.

Так создание износостойких материалов исследовалось на основе порошков  $Al_2O_3$  и  $MgAl_2O_x$  с добавкой порошков  $TiO_2$  и  $ZrO_2$ . Микротвёрдость таких керамик достигает 24 ГПа при размере зерна не выше 300 нм. При этом износостойкость разгонных насадков для аппаратов гидроабразивного резания возросла более, чем в 3 раза.

На основе нанопорошков  $Al_2O_3$  и нержавеющей стали с размером частиц 9-40 мкм созданы металлокерамические плазменные катоды для технологических ускорителей электронов. Испытания показали, что при ресурсе  $> 5 \cdot 10^8$  импульсов катоды не изменили своих характеристик.

Проведены предварительные исследования на плоских образцах для создания твердых электролитов для высокотемпературных топливных элементов и кислородных насосов. Так керамика 9.8YSZ ( $ZrO_2$  стабилизированный 9.8% мольн.  $Gd_2O_3$ ) при размере зерна 70 нм позволила получить плотность мощности 470 Вт/см<sup>2</sup> и плотность тока 0.91 А/см<sup>2</sup>, что в 1.5 раза выше значений для микроструктурной керамики.

Использование для прессования смеси порошков  $Al_2O_3$  и металлического алюминия позволяет получать механически обрабатываемые заготовки для изготовления струеформирующих форсунок из корунда для очистки поверхности насосно-компрессорных труб. Относительная плотность готовых керамических изделий была на уровне 96-98 % при микротвёрдости около 20 ГПа и трещиностойкости 5-5.5 МПа·м<sup>1/2</sup>.

Горячее МИП позволяет создавать металломатричные композиты на основе Al – ( $Al_2O_3$ , SiC) и Fe – ( $SiO_2$ ,  $Fe_3C$ , TiC).

Импульсное прессование смеси порошка Al и микронных порошков SiC позволяет получать материал с плотностью близкой к 100%, в котором зерна матрицы имеют размер 100-300 нм, и Al хорошо смачивает поверхность частиц SiC без образования каких-либо химических соединений в переходных слоях.

Использование окисленных наночастиц алюминия при прессовании приводит к получению плотного композита Al –  $Al_2O_3$  с микротвёрдостью до 3 ГПа, что на порядок выше, чем у Al, которая стабильна в широком интервале температур. Данная технология имеет хорошие перспективы для создания материалов с высокими эксплуатационными характеристиками.

Композитная система Fe –  $SiO_2$  при низкой плотности  $\sim 3$  г/см<sup>3</sup> имеет достаточно высокую микротвёрдость  $\sim 3$  ГПа, хорошую пластичность и абсолютную коррозионную устойчивость за счёт капсуляции частиц железа в оболочку из силикатов. Компакты Fe ÷  $Fe_3C$ , синтезированные в кремнийсодержащей органической среде, при плотности 7.4 г/см<sup>3</sup> обладают высокой микротвёрдостью (11 ГПа) и термостабильностью за счёт формирования регулярной сетки цементита, стойкостью к локальным видам коррозии и высокой электрокаталитической активностью.

## РАСПРОСТРАНЕНИЕ ДЛИННЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛН ПО ПЛОСКИМ СТРУЯМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЖИДКОСТИ В ТАНГЕНЦИАЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

*Зубарев Н.М.\**, *Зубарева О.В.*

Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [nick@iep.uran.ru](mailto:nick@iep.uran.ru)

В недавней работе [1] было показано, что трёхмерные волны произвольной конфигурации могут распространяться без искажений по поверхности диэлектрической жидкости вдоль направления горизонтального электрического поля. Подобный режим распространения волн реализуется для жидкостей с большими значениями диэлектрической проницаемости в случае достаточно сильного внешнего поля, когда влияние электростатических сил будет доминирующим.

В настоящей работе демонстрируется, что аналогичная ситуация возникает и при распространении волн по плоским струям диэлектрической жидкости, для которых имеется не одна, а уже две свободные поверхности. То обстоятельство, что как симметричные, так и антисимметричные линейные длинные волны могут распространяться без дисперсии, непосредственно следует из соответствующих дисперсионных соотношений (см., например, [2]). Как оказывается, симметрия уравнений электрогидродинамики, обусловленная тем, что потенциалы скорости и электрического поля задаются сходными уравнениями, приводит к тому, что и нелинейные волны могут без дисперсии распространяться вдоль направления внешнего поля. При этом амплитуда волн не влияет на их скорость. Это означает, что трёхмерные уравнения движения допускают точные решения, которые содержат две произвольных функции двух переменных, задающих начальную форму волны (форму каждой из двух границ плоской струи) [3].

Наибольшее внимание в работе уделено рассмотрению частного случая плоских симметричных волн, для которого возможно использование конформных переменных (осуществляется отображение области, занимаемой жидкостью, в горизонтальную полосу). Получено дисперсионное соотношение для мелкомасштабных возмущений точных волновых решений уравнений движения. Показано, что частота колебаний всегда вещественна, что доказывает устойчивость волн произвольной конфигурации по отношению к малым возмущениям. Также нами описано взаимодействие встречных симметричных уединённых волн малой, но конечной амплитуды. Как оказалось, после столкновения они сохраняют как фазу, так и форму.

Следует отметить, что наши результаты применимы для описания волн на плоской струе жидкости в горизонтальном магнитном поле (при этом напряжённость электрического поля следует заменить на напряжённость магнитного поля, а диэлектрическую проницаемость на магнитную).

*Данная работа выполнена при поддержке Совета по грантам при Президенте РФ (проект МД-4049.2010.2) и РФФИ-Урал (проект 09-08-00198) в рамках Программы Президиума РАН «Фундаментальные проблемы нелинейной динамики».*

1. Зубарев Н.М., Письма в ЖЭТФ, **89**, 317 (2009)
2. Grandison S., Papageorgiou D.T., Vanden-Broeck J.-M., Eur. J. Mech. B, **26**, 404 (2007)
3. Zubarev N.M., Zubareva O.V., Phys. Rev. E (accepted for publication, 2010)

**РАВНОВЕСНЫЕ КОНФИГУРАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ КАПЛИ  
ПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ НА ПЛОСКОМ ЭЛЕКТРОДЕ  
В ЛОКАЛЬНО НЕОДНОРОДНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ**

*Зубарева О.В.\* , Зубарев Н.М.*

Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: olga@ami.uran.ru

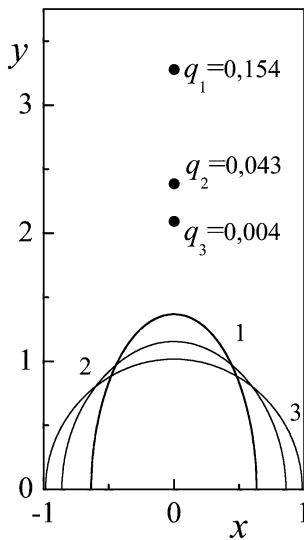


Рис. 1. Формы поверхности капли для различных зарядов нити.

В отсутствии внешнего электрического поля цилиндр круглого сечения представляет собой равновесную конфигурацию свободной поверхности проводящей жидкости. При появлении поля поверхность жидкости деформируется электростатическими силами, компенсация которых капиллярными силами может привести к возникновению новых равновесных конфигураций. В случае однородного электрического поля для формы поверхности капли известно единственное частное точное нетривиальное решение [1,2].

В настоящей работе мы нашли однопараметрическое семейство нетривиальных точных решений для равновесной конфигурации двумерной капли проводящей жидкости, находящейся на плоском электроде, в электрическом поле равномерно заряженной бесконечной прямой нити, расположенной параллельно поверхности жидкости. Следует отметить, что численные решения этой задачи были ранее получены в [3]. При увеличении напряжённости внешнего поля поверхность капли будет существенно деформироваться, вытягиваясь вдоль поля (см. рисунок). При этом отношения характерных масштабов в поперечном сечении капли будет меняться от единицы, что соответствует нулевому заряду нити, до  $23/4$ , что соответствует значительной деформации капли. Отметим, что в рамках теории возмущений по малому параметру – амплитуде деформации поверхности – подобные точные нетривиальные решения получить в принципе невозможно.

При решении задачи нами использовалось конформное преобразование области над жидкостью в область вне круга единичного радиуса. При этом исходная задача о нахождении распределения потенциала электрического поля (он задаётся двумерным уравнением Пуассона) с условием эквипотенциальности неизвестной границы превращается в задачу с аналогичным условием на дуге окружности единичного радиуса. Она решается при помощи метода изображений. Неизвестной при этом оказывается отображающая функция, которую удаётся найти, подбирая рациональные решения для условия баланса капиллярных и электростатических сил. Использованный в работе подход может быть также применён для анализа равновесных конфигураций поверхности идеально проводящей жидкости в тангенциальном магнитном поле параллельного поверхности тонкого проводника с током.

*Данная работа выполнена при поддержке Совета по грантам при Президенте РФ (проект МД-4049.2010.2) и РФФИ-Урал (проект 10-08-96016) в рамках Целевой программы поддержки междисциплинарных проектов УрО РАН и СО РАН.*

1. Zubarev N.M. and Zubareva O.V., Tech. Phys. Lett., **3**(10), 862, (2005)
2. McLeod E.B., Arch. Ration. Mech. Anal., **4**, 557, (1955)
3. Blyth M.G. and Vanden-Broeck J.-M., SIAM J. Appl. Math., **66**, 174 (2005)

**НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА  
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ В ВЕРТИКАЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ**

*Зубарев Н.М.<sup>1</sup>, Кочурин Е.А.<sup>1,2\*</sup>*

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

<sup>2</sup>Уральский Государственный Университет им. А. М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kochurine@e1.ru

Настоящее исследование посвящено теоретическому анализу динамики поверхности раздела двух идеальных диэлектрических жидкостей, находящихся в сильном вертикальном электрическом поле. Неустойчивость поверхности раздела в линейном приближении была исследована, например, в работе [1]. Учёт нелинейности существенно усложняет рассмотрение уравнений движения жидкостей с границей раздела. В недавней работе [2] был выявлен режим движения жидкостей, для которого потенциалы скорости и электрического поля линейно связаны, что позволило вдвое сократить число уравнений движения. При этом влияние силы тяжести не учитывалось, что соответствовало рассмотрению лишь коротких волн.

В настоящей работе мы обобщили данный подход на случай, когда гравитационные силы учитываются наряду с электростатическими, считалось, что тяжёлая жидкость находится над лёгкой. Как оказалось, редукция возможна при условиях:  $\frac{dE(t)}{dt} \approx g(t)$ ,  $\epsilon_1 \rho_1 = \epsilon_2 \rho_2$ , где  $E(t)$  – внешнее электрическое поле,  $g(t)$  – эффективное ускорение свободного падения,  $\rho_1, \rho_2$  – плотности верхней и нижней жидкости, соответственно,  $\epsilon_2$  – диэлектрические проницаемости верхней и нижней жидкости.

В рамках данного подхода удалось получить нелинейное уравнение динамики поверхности раздела жидкостей с точностью до квадратичных слагаемых. Для плоского случая оно имеет вид:

$$\eta_\tau = -\gamma \hat{H} \eta_x - \gamma^2 (\eta \eta_x)_x - \gamma^2 (\hat{H} \eta \hat{H} \eta_x)_x, \quad (1)$$

где  $\hat{H}$  – оператор Гильберта,  $\gamma = (\epsilon_2 - \epsilon_1)/(\epsilon_2 + \epsilon_1)$  – параметр среды,  $\tau = \iint g(t) dt$  – вспомогательная переменная времени. Уравнение (1) допускает широкий класс точных частных решений, представляющих собой суперпозицию локализованных возмущений, имеющих следующий вид:

$$\eta(\tau, x) = \frac{S a(\tau)}{x^2 + a^2(\tau)},$$

где  $S$  – параметр,  $a(\tau)$  – функция времени, характеризующая амплитуду возмущения.

В зависимости от знака параметра  $S$ , определяющим направление возмущения полученное решение переходит либо в стационарный режим, чему соответствует формирование заряженной лунки, либо становится сингулярным за конечный промежуток времени, после которого решение теряет физический смысл.

*Данная работа выполнена при поддержке Совета по грантам при Президенте РФ (проект МД-4049.2010.2), в рамках Программы Президиума РАН «Фундаментальные проблемы нелинейной динамики».*

1. Melcher J.R. Field-Coupled Surface Waves. MIT Press, Cambridge, MA, (1963)
2. Zubarev N.M., Phys. Fluids, **18**, art. no. 028103 (2006)

## МАЛОГАБАРИТНЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ УСКОРИТЕЛЬ ДЛЯ РАДИАЦИОННЫХ ТЕСТОВ

Реутова А.Г.\*, Шунайлов С.А., Шпак В.Г., Яландин М.И.

Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: anuta@iep.uran.ru

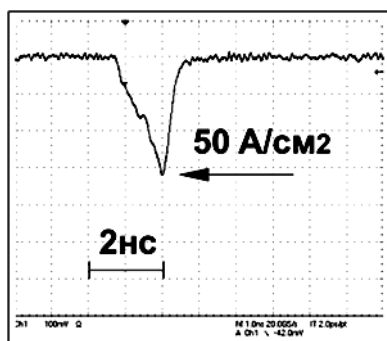


Рис. 1. Импульс тока для диода с металлокерамическим катодом (зазор 3.5 мм).

Малогобаритные сильноточные ускорители удобны для исследования радиационных эффектов, отработки радиационных технологий. Такие электрофизические приборы предназначены для создания компактных экспериментальных установок, использующих различные конструкции ускорительных трубок. Основные требования в этом случае предъявляются к характеристикам электронного тока. Размеры пучка и длительность импульса тока должны быть минимизированы из соображений возможных радиационных повреждений образца и компактности локальной биологической защиты от сопутствующего тормозного излучения.

Разработан специализированный экспериментальный макет установки для проведения радиационных исследований различных материалов. Высоковольтный импульсный источник питания РАДАН-ЭКСПЕРТ [1] формирует импульсы напряжения  $\sim 150$  кВ, длительностью  $\sim 2$  нс с фронтом  $\sim 400$  пс на катоде электронного диода специально разработанной конструкции. Для удобства работы и с возможностью облучения сыпучих и жидких образцов (материалов), ускоритель размещён вертикально трубкой вниз на специально разработанной подставке. Подставка объединяет в себе функции радиационной защиты от сопутствующего тормозного излучения и экспериментальной кюветы для установки облучаемого образца. В корпусе подставки размещён также привод механизма регулировки зазора диода, что позволяет производить подстройку характеристик пучка без выключения насоса.

Разработанный диод коаксиальной конструкции включает холодный катод и выходное фольговое окно диаметром 20 мм. Он позволяет получать импульсы тока с плотностью до  $100 \text{ A/cm}^2$  на расстоянии 15 мм от анодной фольги (Al, 40 мкм) длительностью до 1 нс. Остаточного давления  $\sim 3 \times 10^{-1}$  Торр вполне достаточно для устойчивой работы диода.

Анализировались различные варианты конструкций трубчатых и планарных катодов (графитовых, металлокерамических и т.п.). Коаксиальный металлокерамический катод позволяет существенно увеличить ресурс фольги (Al, 40 мкм) до  $\sim 4 \times 10^4$  импульсов при плотности тока  $\sim 50 \text{ A/cm}^2$  в 15 мм от анода (рис. 1).

*Работа выполнена в соответствии с темой «Генерация мощных потоков корпускулярного и электромагнитного излучения» № 01.2.00 950808, а также при поддержке РФФИ, гранты № 09-08-00371-а; № 10-08-00081-а.*

1. Mesyats A., Korovin S.D., Rostov V.V., Shpak V.G., and Yalandin M.I., Proceedings of the IEEE, **92**, 7, 1166 (2004)

## ВЛИЯНИЕ ИОННОЙ БОМБАРДИРОВКИ НА СТРУКТУРУ ПОВЕРХНОСТИ АВТОЭМИССИОННОГО КАТОДА

Кузнецов В.Л.\*, Терентьева В.А., Петров С.В., Скоморохов Д.С., Кислов Е.А., Чепусов А.С.,  
Комарский А.А.

Институт Электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kuznetsov@iep.uran.ru

Традиционно для повышения плотности тока с автоэмиссионного катода увеличивают число микроострий, являющихся центрами эмиссии. Перспективными с этой точки зрения являются углеродные материалы, поскольку обладают множеством форм с размерами порядка нескольких нанометров (одностенные и многостенные нанотрубки, фуллерены, графеновые нити). Существует несколько методов создания автоэмиссионных катодов из подобных структур, к недостаткам которых помимо технологической сложности изготовления можно отнести недостаточное время работы катода при значительных токах эмиссии. Увеличить срок службы катода возможно, добившись регенерации автоэмиссионных центров на его поверхности непосредственно во время работы устройства. В настоящей работе проводится исследование изменений структуры поверхности катода из углеродных материалов (коксопечковые композиции с различной температурой спекания) при бомбардировке ионами остаточных газов вакуумного объема.

Экспериментальная установка детально описана в работе [1]. Для регистрации изображений областей эмиссии внесены изменения в конструкцию измерительной ячейки. Анод изготовлен из медной сетки, к которой прикладывается высокое напряжение. Для визуализации изображения используется люминесцентный экран, расположенный выше сетки. Регистрация данных производится через выходное окно вакуумной камеры на ПЗС камеру.

При проведении экспериментов в автоматическом режиме регистрируется ток эмиссии, напряженность поля между электродами ячейки, давление в вакуумной камере. Дополнительно производится видеосъемка процессов на поверхности катода при различном давлении. Давление в ходе экспериментов изменяется путем напуска газов (аргон или азот) через натекагель. В зависимости от давления изменяется интенсивность ионной бомбардировки поверхности образца. Обработка видеоматериала позволяет оценить площадь эмитирующей поверхности катода и получить зависимости в координатах плотности тока эмиссии.

Для оценки изменения структуры поверхности образца, прошедшие серию измерений, исследуются на атомно-силовом микроскопе (АСМ) и сканирующем туннельном микроскопе (СТМ). Также для этих образцов исследуются рентгеновские фотоэлектронные спектры на спектрометре ИФМ-4. Измерения проводятся для рабочей (сторона образца, с которой происходила эмиссия) и нерабочей сторон, что позволяет оценить изменения, произошедшие при бомбардировке поверхности углеродного материала в экспериментальной ячейке. При обработке оже-спектров установлено, что на рабочей стороне происходит изменение типа гибридизации углерода с  $sp^2$  на нерабочей стороне на  $sp^3$  на рабочей стороне [2]. Изображения поверхности образцов, полученные при исследовании на АСМ и СТМ, подтверждают изменение структуры при работе катода.

При работе автоэмиссионного катода из коксопечковых композиций в условиях бомбардировки поверхности ионами остаточных газов происходит изменение типа гибридизации углерода и перестройка поверхности катода.

1. Кислов Е.А., Кузнецов В.Л., Скоморохов Д.С., Терентьева В.А., Филатов А.Л., Альтернативная энергетика и экология, **3**, 40 (2010)
2. Galuska A.A., Madden H.H., Allred R.E., Applied Surface Science **32**, 253 (1988)

# **НАНОМАТЕРИАЛЫ**





## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ МЕЖДУ ДЕФОРМАЦИЕЙ ГРАФЕНОВЫХ СЛОЁВ И МИГРАЦИЕЙ ВАКАНСИЙ

*Ананьева Ю.Е.*

Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, Россия

\*E-mail: zayka\_net@pisem.net

Производство графена – трудоемкий процесс. Образующие структуры обладают дефектами, оказывающими влияние на свойства материала. Для уменьшения концентрации дефектов либо их локализации предлагается рассмотрение приложения внешнего давления к структуре.

В работе моделировались структуры, имеющие одиночную и двойную вакансию, содержащие 139 и 138 атомов углерода соответственно. Для выявления влияния внешнего давления рассматривались структуры с уменьшенными и увеличенными векторами трансляции вдоль направления миграции вакансии на 2 и 5 % (условно положительное направление – растяжение структуры, отрицательное – сжатие). При этом проводился расчёт энергии вакансии, а также параметры миграции моновакансии в графене.

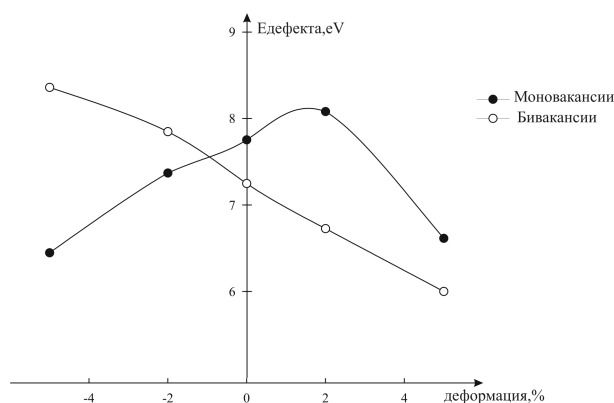


Рис. 1. Зависимость энергии дефекта от деформации

Вычисления выполнялись в рамках формализма функционала локальной плотности (DFT) с использованием пакета VASP [1]. Суперячейка имела размерность  $5 \times 7$  прямоугольных ячейки графена, что соответствовало  $21.274 \times 17.196 \text{ \AA}$ . Расчёты проводились с учётом периодических условий. Расчёты проводились с использованием разбивки обратного пространства на сетку по методу Monkhorst Pack размерностью  $3 \times 3 \times 1$ . Результат расчётов энергии моно- и бивакансии представлены на рисунке 1.

Обнаружено, что энергия одиночного дефекта у структур без деформации выше, чем у структур с деформацией (за исключением случая растяжения на 2 %). В случае структур с бивакансиями энергия дефекта увеличивается при сжатии и уменьшается при растяжении структуры.

Константа скорости миграции дефекта ( $k$ ) в случае недеформированного графена  $-3.40 \cdot 10^{-6} \text{ c}^{-1}$ . При сжатии структуры в направлении параллельном направлению миграции вакансии константа скорости увеличивается ( $2.05 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$ ).

Попытка отжига дефектной структуры может привести к ее разрушению либо хаотичному блужданию дефекта. Деформация оказывает влияние на миграцию дефектов структуре графена. Сжатие структуры в направлении параллельном движению дефектов увеличивает скорость миграции. Структура графена, имеющая одиночные дефекты, при растяжении может стабилизироваться за счёт образования бивакансий. На основании проведенных расчётов возможно создание метода, позволяющего локализовать дефекты в структуре графена не прибегая к отжигу.

1. Hashimoto A., Nature, **430**, 870 (2004)

## НАНОСТРУКТУРЫ ГРАФЕНА В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Волков Д.С.\*, Миронов Г.И.

Марийский государственный университет, г. Йошкар-Ола, Россия

\*E-mail: vdmtriys@mail.ru

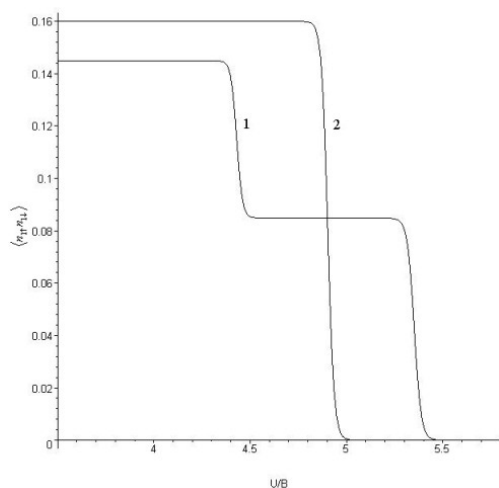


Рис. 1. Зависимость корреляционных функций  $\langle n_{i1} n_{i1} \rangle$  от отношения  $U/V$  при значениях  $U = 6 \text{ eV}$ ,  $\beta = 100 (\text{eV})^{-1}$  ( $\beta = 1/kT$ ). 1 – для 24 атомов, 2 – для 13 атомов.

Сильное кулоновское взаимодействие электронов в графене, сравнимое по порядку величины с их кинетической энергией, выделяет графен в класс сильно коррелированных систем [1], для исследования которых можно применить модель, характеризующуюся гамильтонианом Хаббарда [2]. В модели Хаббарда учитывается кинетическая энергия электронов и кулоновское взаимодействие их на одном узле. Гамильтониан Хаббарда позволяет описать физико-химические свойства графена, основываясь на гипотезе о том, что графен представляет собой плоскую сопряжённую  $\pi$ -систему. Эта гипотеза позволяет рассчитать как энергетический спектр, так и корреляционные функции, характеризующие в модели графена перескоки электронов с узла на узел, а также вероятности появления на одном узле наносистемы двух электронов с противоположно направленными проекциями спинов.

Целью нашей работы является получение аналитических выражений для функций Грина для структурных элементов графена, включающих различные, увеличивающиеся по количеству ато-

мы, поскольку именно функции Грина содержат информацию об основных свойствах исследуемых систем.

Простейшим структурным элементом графена является гексагон - шестичленный цикл, теоретическому изучению которого посвящена работа [3]. Для того, чтобы понять свойства графена как бесконечной двумерной системы, будем последовательно окружать выбранный шестичленный цикл из атомов гексагонами, а затем проведем окружение одного атома гексагонами. Центральный гексагон вместе с первым ближайшим окружением из шестиугольников будет содержать 24 атома, включая следующее ближайшее окружение – 54 атома углерода. Ближайшее окружение одного атома будет содержать 13 атомов. Дальнейшее окружение одного атома шестиугольниками будет содержать 37 атомов. Выделяя шестичленные циклы ближайшего и следующего по близости окружения, мы хотим понять, как будут изменяться энергетический спектр и термодинамические средние наносистем из атомов углерода в случае, если бы синтез графена в процессе самоорганизации происходил путем последовательного присоединения к выбранному шестичленному циклу или к одному атому все новых атомов и гексагонов по кругу. Получая аналитические выражения для функции Грина, строим графики зависимости корреляционных функций для различных наноструктур (рис. 1). Зная полюса функции Грина, строим энергетические спектры исследуемых наносистем.

1. Castro Neto A.H., Guinea F, Peres N.M.R., Novoselov K.S., Geim A.K., Rev. Mod. Phys., **81**, 112 (2009)
2. Hubbard J., Proc. Roy. Soc., **276**, 238 (1963)
3. Миронов Г.И., ФТТ, **49**, 527 (2007)

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
МАГНИТНЫХ НАНОДИСПЕРСНЫХ КОЛЛОИДОВ:  
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПЯТОГО ВИРИАЛЬНОГО КОЭФФИЦИЕНТА  
В РАЗЛОЖЕНИИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ**

*Епифанов Ю.А.*

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: oba\_dug@e1.ru

Устойчивые коллоидные дисперсии магнитных наночастиц в жидких носителях называют магнитными жидкостями или феррожидкостями [1]. Магнитные жидкости, благодаря их способности ощутимо взаимодействовать с внешним магнитным полем, сохраняя при этом жидкое состояние, получили широкое применение в приборостроении и медицине. Магнитные жидкости активно применяются как новые наноматериалы и используются в различных технологических процессах. За последнее десятилетие с использованием магнитных жидкостей были разработаны новые методы магнитного транспорта лекарств, диагностики и лечения злокачественных опухолей.

В данной работе делается попытка уточнить формулу вириального разложения свободной энергии магнитной жидкости [2]. Магнитная жидкость моделируется системой монодисперсных дипольных твердых сфер. Каждая феррочастица характеризуется радиус-вектором положения ее центра масс и вектором, определяющим направление ее магнитного момента. Парные взаимодействия между феррочастицами описываются суммой двух потенциалов: магнитного диполь-дипольного взаимодействия и потенциалом взаимодействия твердых сфер. Используя вириальное разложение в ряд по степеням концентрации феррочастиц [3] определяется свободная энергия магнитной жидкости. Каждый вириальный коэффициент вычисляется путем нормированного усреднения потенциалов взаимодействия феррочастиц по всем их координатам и по ориентации их магнитных моментов. Рассчитан 5-й вириальный коэффициент, учитывающий многочастичные корреляции, что позволяет использовать полученные результаты для концентрированных магнитных жидкостей.

1. Гиршфельдер Дж, Кертисс Ч., Берд Р., Молекулярная теория газов и жидкостей, М.: Иностран.лит., 930 (1961)
2. Елфимова Е.А., Епифанов Ю.А., Определение четвертого вириального коэффициента в разложении свободной энергии магнитных жидкостей, Сб. трудов 14-ой международной научной конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям, Плес., 163-168 (2010)
3. Балеску Р., Равновесная и неравновесная статистическая механика, М.:Мир, 1, 405 (1978)

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКЛАСТЕРОВ ПЛАТИНЫ

Замулин И.С.

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

\*E-mail: Uoan\_001@mail.ru

Произведенные по какой-либо из существующих сейчас методик нанокластеры являются неотъемлемой частью уже действующих нанотехнологий. К примеру, нанопорошки металлов нашли широкое применение в качестве многофункциональных присадок к различного рода маслам, смазкам, доводочно-притирочным пастам и суспензиям. Так же весьма перспективно использование нанопорошков металлов в композиционных материалах, содержащих пластмассы и полимеры. В этом случае возможно изготовление пластиковых магнитов, электропроводящей резины и красок. Так же применение полученных результатов в нанотехнологии может быть отображено в создании новых устройств, имеющих меньший вес и более экономный процесс работы с точки зрения энергопотребления.

Необходимо отметить, что экспериментальные технологии определения структуры оказались не лишёнными недостатков. Так, в экспериментах по дифракционному рассеянию исследуется лишь кластерные ансамбли, в результате чего происходит сглаживание свойств отдельных частиц. Компьютерное моделирование является наиболее подходящим методом изучения внутренней организации наночастиц. Современная компьютерная техника с использованием реалистичных межатомных потенциалов способна правдоподобно моделировать частицы нанометрового диапазона при временах порядка нескольких наносекунд.

В данной работе было проведено компьютерное моделирование процессов термической обработки наночастиц платины методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи (*tight-binding*). Данные потенциал широко используются при различного рода компьютерном моделировании, как макроскопических тел, так и кластеров. Температура в процессе моделирования определялась по средствам средней кинетической энергии атомов, которая рассчитывалась на основе скоростного алгоритма Верлета с шагом по времени  $h=2$  фс. Точки плавления и кристаллизации кластера фиксировались по скачку потенциальной энергии и параметра решётки как функций температуры, что приводит к возрастанию теплоёмкости в очень узкой температурной области вокруг точки перехода. Данный подход достаточно широко используется при компьютерной имитации процессов плавления (кристаллизации) металлических нанокластеров и позволяет довольно точно локализовать их начало.

Для исследования термодинамических свойств платины выбирались частицы диаметром от 2 до 6 нм при первоначально идеальной ГЦК структуре. Температура частиц повышалась (понижалась) ступенчато с шагом 50 К в интервале от 300 К до 1850 К. Вблизи фазового перехода шаг температуры понижался до 5 К, для более точного определения температуры фазового перехода. В результате проведённого исследования была определена температура плавления (кристаллизации) наночастиц платины. Полученные температуры не равны, и образуют область, в которой кластер находится в двухфазном состоянии. Так же было определено, что при увеличении размера частицы увеличивается температура перехода в другое фазовое состояние.

**ГИГАНТСКИЙ МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ В СИСТЕМАХ CoFe/Cu***Киселёва М.С.\**, Миляев М.А., Наумова Л.И., Проглядо В.В., Банникова Н.С.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kistemka@gmail.com

Интерес к изучению сверхрешёток на основе CoFe/Cu обусловлен обнаруженным в них большим гигантским магнитосопротивлением (ГМС)  $20 \div 40$  % при комнатной температуре, относительно малым гистерезисом и их высокой температурной стабильностью [1,2]. В работе исследованы магнитные и магниторезистивные свойства сверхрешёток  $[\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}(15\text{Å})/\text{Cu}(23\text{Å})]_8$ , приготовленных методом магнетронного распыления на высоковакуумной установке MPS-4000C6 (ULVAC, Япония). Изучено влияние материала и толщины буферного слоя на величину ГМС и магнитный гистерезис. В качестве материалов буферного слоя были использованы Cu, Cr, Fe,  $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$  с различными толщинами.

В ходе работы было изучено 20 образцов сверхрешёток. Магнитосопротивление измерялось при комнатной температуре стандартным четырехконтактным методом. Намагниченность и петли магнитного гистерезиса измерялись с помощью вибрационного магнитометра и магнитооптической установки miniMOKE.

Было показано, что использование буферного слоя хрома сильно влияет на магнитосопротивление и гистерезис сверхрешёток. При малой толщине хрома  $t_{\text{Cr}} < 15\text{Å}$  реализуется состояние с малой коэрцитивной силой ( $H_c = 15 \div 20\text{Э}$ ). Небольшое изменение толщины хрома ( $\Delta t_{\text{Cr}} = 5\text{Å}$ ) приводит к резкому увеличению коэрцитивной силы (в 16 раз) при незначительном возрастании (на 30 %) величины ГМС. Рентгеновские исследования показали, что обнаруженный переход от низкокоэрцитивного состояния к высококоэрцитивному сопровождается изменением кристаллической структуры слоев CoFe и Cu, а именно, исчезает текстура типа (111). Максимальному значению ГМС ( $\Delta R/R = 21\%$ ) соответствует толщина буферного слоя хрома  $t_{\text{Cr}} = 30\text{Å}$ .

Установлено, что образцы с буферным слоем из сплава  $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$  также обладают большим значением магнитосопротивления ( $\Delta R/R = 21\%$ ), однако в отличие от сверхрешёток с буферным слоем хрома их коэрцитивная сила в 8 раз меньше, а следовательно, в 8 раз больше магниторезистивная чувствительность. Максимальному значению ГМС соответствует толщина буферного слоя хрома  $t_{\text{CoFe}} = 15\text{Å}$ . Было показано, что при использовании в качестве буферного слоя меди практически не влияет на величину магнитосопротивления и коэрцитивной силы. Также были исследованы образцы с железным буфером различной толщины. Максимальная величина ГМС  $\Delta R/R=15\%$  и коэрцитивная сила  $H_c=50\text{Э}$  получены на сверхрешётках с толщиной буферного слоя железа  $t_{\text{Fe}} = 20\text{Å}$ .

Таким образом, в результате исследований было установлено, что наиболее подходящим для сверхрешёток  $[\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}(15\text{Å})/\text{Cu}(23\text{Å})]_8$  является буферный слой из сплава  $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$ , напыление которого на подложку из Si или  $\text{Al}_2\text{O}_3$  приводит к трехкратному увеличению магнитосопротивления без существенного изменения коэрцитивной силы. Сверхрешётки CoFe/Cu с буферным слоем  $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$  обладают наибольшей магниторезистивной чувствительностью к внешнему магнитному полю.

*Работа выполнена в рамках темы «Спин», при поддержке Программы Президиума УрО РАН (проект № 09-П-2-1037), Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект № 10-02-00590) и проекта ОФН РАН № 09-Т-2-1014.*

1. Gangopadhyay S., Shen J.X., Kief M.T., Barnard J.A., and Parked M.R., IEEE Transactions On Magnetics, **31**, 6, 3933 (1995)
2. Kanai H., White R.L., IEEE Transactions On Magnetics, **29**, 6, 2729 (1993)

## МЕЖЧАСТИЧНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В НАНОДИСПЕРСНЫХ МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЯХ: УЧЁТ ПОЛИДИСПЕРСНОСТИ

*Крутикова Е.В.\**, *Елфимова Е.А.*

Уральский государственный университет им.А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: Ekaterina.Krutikova@usu.ru

Магнитные жидкости относятся к нанодисперсным магнитным материалам, нашедшим широкое применение в различных отраслях промышленности. Сейчас они активно внедряются в медицинскую сферу. Магнитные жидкости, состоящие из магнитных наночастиц, взвешенных в жидкости-носителе, обладают сложной внутренней структурой.

Присутствие межчастичных корреляций оказывает существенное влияние на важнейшие макроскопические характеристики системы, например, осмотическое давление, сжимаемость, внутреннюю и свободную энергию и им подобные. Межчастичные корреляции в нанодисперсных магнитных жидкостях описываются парной функцией распределения  $g(\vec{r}, \lambda)$ , которая имеет смысл плотности вероятности нахождения двух случайно выбранных частиц на заданном расстоянии. В общем случае, парная функция распределения зависит от вектора расстояния между центрами случайно выбранных первой и второй частиц  $\vec{r}$  и от параметра диполь-дипольного взаимодействия  $\lambda$ , имеющего смысл отношения магнитной энергии пары контактирующих частиц к тепловой.

Данная работа посвящена разработке теоретической модели, позволяющей определить парную функцию распределения в магнитных жидкостях при учёте полидисперсности частиц. Исследование многокомпонентных систем является весьма тяжёлой численной задачей. Однако вносимые полидисперсностью особенности поведения магнитных жидкостей могут быть отслежены уже на бинарной системе. В рамках разработанной модели был осуществлен переход от непрерывного распределения феррочастиц по размерам в реальных магнитных жидкостях к модельной бидисперсной системе. Магнитная жидкость моделировалась системой бидисперсных твёрдых дипольных сфер с диаметрами частиц –  $d_s$  и  $d_l$ , и соответствующими магнитными моментами –  $\vec{m}_s$  и  $\vec{m}_l$ . В рамках бидисперсной модели, где все частицы формально делятся на два класса (частицы с разными диаметрами, условно «мелкие» и «крупные»), отдельно рассматривались характерные расстояния между центрами частиц –  $r_{ss}$  («мелкая» – «мелкая»),  $r_{ll}$  («крупная» – «крупная») и  $r_{sl}$  («мелкая» – «крупная»), и строились соответствующие им три различные составляющие парной функции распределения. Метод расчёта парных функций распределения подробно описан в работах [1, 2] для случая моделирования частиц монодисперсными дипольными мягкими \ твердыми сферами.

Таким образом, была построена парная функция распределения в нанодисперсных магнитных жидкостях при учёте полидисперсности частиц. Следующим шагом работы является сравнение построенной теоретической бидисперсной модели с результатами физического и компьютерного экспериментов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 08-02-00647, РФФИ № 10-02-90727-моб\_ст, гранта АВЦП № 2.1.1/1535, ФАНИ г/к 02.740.11.0202 и гранта Президента МК-1673.2010.2.*

1. Елфимова Е.А., Иванов А.О., ЖЭТФ, **137**, 1, (2010)
2. Cerda J., Elfimova E., Ballenegger V., Krutikova E., Ivanov A., Holm C., Physical Review E., **81**, (2010)

## ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В МАГНИТНЫХ НАНОЖИДКОСТЯХ

Кузнецов А.С.\*, Елфимова Е.А.

Уральский госуниверситет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kookoo@e1.ru

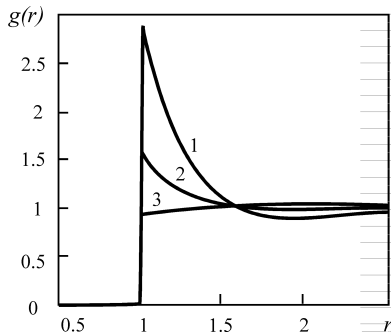


Рис. 1. Парная функция распределения для различных параметров системы.

Для описания межчастичных взаимодействий в работе построена парная функция распределения  $g(\mathbf{r}, \lambda, \alpha)$ , которая зависит от вектора  $\mathbf{r}$ , связывающего центры двух случайно выбранных частиц,  $\lambda = m^2 / d^3 k_B T$  — параметра магнитно-дипольного взаимодействия, (где  $m$  — магнитный момент частицы,  $d$  — диаметр феррочастицы,  $k_B T$  — тепловая энергия),  $\alpha$  — параметра Ланжевена. Парная функция распределения представляется в виде ряда по степеням объёмной концентрации  $\varphi$ . Для получения вириальных коэффициентов был использован метод скелетных диаграмм. Вычислены второй (соответствующий  $\varphi^0$ ) и третий (соответствующий  $\varphi^1$ ) коэффициенты вириального разложения с точностью до  $\lambda^2$ .

На рис.1 представлена парная функция распределения для следующих параметров системы. Парная функция распределения магнитной жидкости с объёмной концентрацией феррочастиц  $\varphi=0.1$ , параметром магнитно-дипольного взаимодействия  $\lambda=1$  во внешнем магнитном поле  $\alpha=5$  в направлениях, параллельном полю  $\theta=0$  (кривая 1) и перпендикулярном полю  $\theta = \pi/2$  (кривая 3). Здесь  $\theta$  — угол между радиус-вектором  $\mathbf{r}$  и направлением магнитного поля. Для сравнения приведена парная функция распределения данной магнитной жидкости в отсутствие поля (кривая 2). Наблюдается анизотропия парной функции распределения.

Таким образом, в работе построена парная функция распределения частиц магнитной жидкости во внешнем магнитном поле. Поведения парной функции распределения исследовалось для следующих параметров системы: объёмная концентрация феррочастиц 0.05-0.2, параметр магнитно-дипольного взаимодействия 0.5-1.5,  $\alpha \leq 5$ . Для заданных параметров, образование агрегатов частиц в магнитной жидкости маловероятно. Однако анизотропия парной функции распределения во внешнем однородном магнитном поле наблюдалась, что объясняется межчастичными корреляциями.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 08-02-00647, гранта АВЦП № 2.1.1/1535, ФАНИ г/к 02.740.11.0202 и гранта Президента МК-1673.2010.2.*

**ПЬЕЗОРЕЗИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ  
В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ И ГРАФЕНОВЫХ ЛЕНТАХ**

*Ляпкосова О.С.\*, Лебедев Н.Г.*

Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Россия

\*E-mail: lyapkosovaolga@mail.ru

В работе представлены результаты теоретического исследования пьезорезистивного эффекта в однослойных углеродных нанотрубках (УНТ) «arm-chair» и «zig-zag» типов и графеновых лентах [2].

Зонная структура графита описывается с помощью двумерного дисперсионного соотношения, которое в рамках модели Хаббарда в  $\pi$ -электронном приближении Хюккеля имеет вид [2]:

$$\varepsilon_0(k_x, k_y) = \pm \gamma_0 \left\{ 1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x R}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y R}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y R}{2}\right) \right\}^{1/2}, \quad (1)$$

где  $\gamma_0 \approx 1.4$  эВ – интеграл перескока электрона с одного узла на другой,  $k_x$  и  $k_y$  – разрешенные значения волновых векторов в зоне Бриллюэна,  $R$  – межатомное расстояние.

Эффект пьезосопротивления моделировался путем линейных деформаций растяжения и сжатия, реализованных с помощью варьирования длин межатомных связей, которое отражается в изменении параметров решетки. Принимая во внимание малые смещения атомов, зонную структуру (1) можно разложить в ряд, ограничиваясь первыми двумя слагаемыми:

$$\varepsilon(k_x, k_y) \approx \varepsilon_0(k_x, k_y) + R \frac{\partial \varepsilon}{\partial R} \delta, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_0(k_x, k_y)$  – зонная структура недеформированных наноструктур,  $\delta$  – относительное изменение длины С-С связи.

Согласно современной классификации «arm-chair» нанотрубке соответствует графеновая нанолента «zig-zag» типа, в которой роль диаметра играет ширина ленты, «zig-zag» УНТ – нанолента «arm-chair» типа. Поэтому графеновые ленты имеют аналогичные дисперсионные соотношения зонной структуры, полученные для УНТ.

Под влиянием деформации сжатия происходит уменьшение ширины запрещенной щели, что означает усиление проводящих свойств УНТ. Под влиянием растяжения у полупроводниковых нанотрубок увеличивается запрещенная зона, что уменьшает их проводимость, а металлические остаются проводящими. Проводимость графеновых лент усиливается при продольном сжатии и уменьшается при растяжении. Путем варьирования внешней механической нагрузки, можно создавать наноматериалы с модуляцией ширины запрещенной зоны, а, следовательно, с контролируемо изменяемыми проводящими свойствами.

С использованием метода функций Грина в рамках однозонной модели Хаббарда [3] был проведен теоретический расчет тензора эластопроводимости для УНТ и графеновых лент разных типов.

Пьезорезистивный эффект может быть использован для практической идентификации УНТ, разработки устройств преобразования электромеханической энергии, полупроводниковых приборов и «топологических диэлектриков» на основе графеновых лент.

1. Бир Г.Л., Пикус Г.Е., Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, Москва: Наука (1972).
2. Harris P.J.F., Carbon nanotubes and relative structures, New materials of twenty-first century, N.-York: Cambridge University Press, 336 p. (1999)
3. Тябликов С.В., Методы квантовой теории магнетизма, Москва: Наука (1975)



**ЭЛЕКТРОННОМИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ТРАНСРОТАЦИОННЫХ НАНОСТРУКТУР***Мальшиева А.В.\* , Колосов В.Ю., Елисеева Н.Ю.*

Уральский государственный университет имени А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: mavin07@mail.ru

Ранее было обнаружено (см., например [1]), что при росте кристаллов в аморфных плёнках некоторых веществ может наблюдаться явление закономерного искривления кристаллической решетки ротационного характера недислокационной природы. В данной работе электронно-микроскопически исследованы подобные искажения в плёнках рения, полученных лазерным напылением. Для изучения был использован один из методов электронной микроскопии – метод изгибных контуров, который позволяет с высокой точностью и локальностью определять ориентировки и разориентировки кристаллической решётки, идентифицировать границы зёрен и т.п.

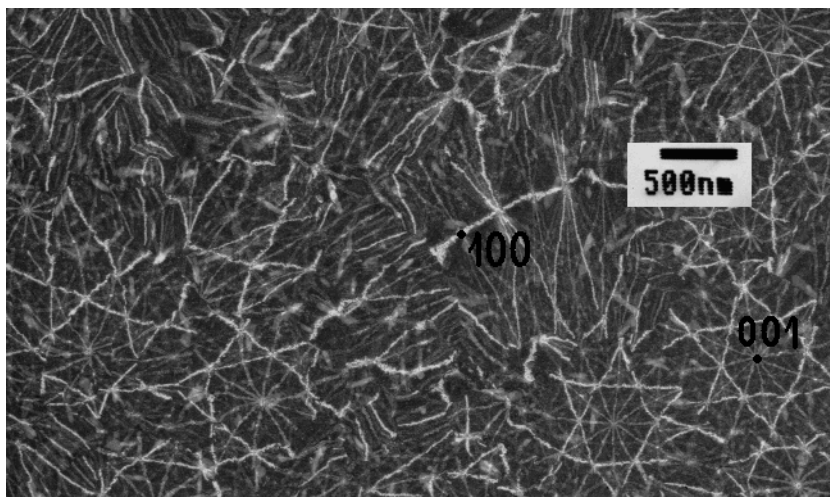


Рис. 1. Электронно-микроскопическое изображение напылённой плёнки рения, выделены 2 наиболее характерные оси зон отражающих плоскостей

В центральной зоне с наиболее крупным размером зерна (0.1-1 мкм) исследованы закономерные картины изгибных экстинкционных контуров. Для удобства анализа построены теоретические карты изгибных контуров с использованием стереографических проекций плоскостей для гексагональной структуры рения для направлений  $\{100\}$  и  $\{001\}$ , которые использовались для анализа разориентировок и границ зёрен. Исследована связь размера зерна с кристаллографическими ориентировками центров кристаллообразования, проведена идентификация малоугловых и большеугловых границ зёрен. Показано, что в зёрнах исследуемых плёнок рения, формируется сильное внутреннее искривление кристаллической решётки. Это искривление не вызвано прогибом фольги или отдельных зёрен.

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки, ГК915.*

1. Kolosov V.Yu. and Thölen A.R., Acta Mater., **48**, 1829 (2000)

**ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРОВ КРИСТАЛЛИТОВ  
НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ  
ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ**

*Мальцева Е.Г.\* , Бабушкин А.Н.*

Уральский государственный университет им. А.М.Горького, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: e.g.maltseva@gmail.com

Исследования последних лет показали, что исходный размер кристалла влияет не только на свойства изделия из наноматериалов. Обнаружено, что меняются такие характеристики, как давление и температуры структурных фазовых превращений, модифицируются фазовые диаграммы. Поэтому исследования связанные с изучением влияния размера кристаллитов на электрические свойства и фазовые переходы наноматериалов весьма актуальны.

Диоксид циркония относится к широко исследуемым и практически важным материалам. Практическая значимость работы связана с изучением электрофизических свойств диоксида циркония, выявлением областей структурной стабильности, влиянием размеров исходного порошка на свойства компактированного материала. Кроме того, важным является изучение динамики протекания процессов при высоких давлениях. В работе исследованы электрические свойства порошковых образцов диоксида циркония с макроскопическим размером зерна и нанокристаллических образцов диоксида циркония с размерами кристаллитов 10, 12 и 54 нм при давлениях 20–50 ГПа при комнатной температуре.

При повышении давления в интервале 30–37 ГПа сопротивление всех образцов уменьшается на 3–4 порядка. Это давление соответствует известному фазовому переходу в орторомбическую фазу. Нами обнаружено, что при уменьшении размеров кристаллитов от 500 до 12 нм давление фазового перехода понижается. Однако при размере образца 10 нм давление перехода резко возрастает.

Проведённые экспериментальные исследования выявили закономерности по влиянию размеров зерна на фазовые переходы при высоких давлениях свидетельствуют о зависимости давления перехода от размеров кристаллитов. Это связано, вероятно, с возрастающим при уменьшении размера частиц вкладом поверхностной энергии межкристаллитных границ в полную энергию кристалла.

*Работа выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы.*

**ВЛИЯНИЕ ОДНООСНОГО РАСТЯЖЕНИЯ ПЛЁНОК ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА НА ШИРИНУ И ЧАСТОТНОЕ ПОЛОЖЕНИЕ СН-ПИКОВ В ИК-СПЕКТРАХ**

*Морилова В.М.<sup>1\*</sup>, Корякова О.В.<sup>2</sup>, Евсюков С.Е.<sup>3</sup>, Песин Л.А.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Челябинский государственный педагогический университет, г. Челябинск, Россия

<sup>2</sup>Институт органического синтеза УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

<sup>3</sup>Evonik Technochemie GmbH, Dossenheim, Germany

\*E-mail: Vika\_M@list.ru

Впервые обнаружена зависимость ширины и частотного положения пиков дублетной СН-полосы поглощения в ИК-спектрах одноосно растянутых образцов плёнок поливинилиденфторида (ПВДФ) от коэффициента растяжения (содержания  $\beta$ -фазы). Образцы для исследования были приготовлены из исходной пленки частично кристаллического ПВДФ марки Купаг толщиной 50 мкм, в которой доминирует  $\alpha$ -конформация цепей полимера. В результате одноосного механического растяжения получили три пленки с коэффициентами удлинения (отношениями конечной длины образца к первоначальной) 1,5; 2 и 4. По методике, предложенной в [1], измерили концентрацию  $\beta$ -фазы полимерного вещества в нерастянутых и растянутых пленках ПВДФ. Доля аморфной составляющей определялась по соотношению площадей под кривыми Гаусса, описывающими область спектра 580–630  $\text{см}^{-1}$  после линейного вычитания фоновой составляющей [2]. В указанном диапазоне частоты 605 и 615  $\text{см}^{-1}$  соответствуют колебаниям молекул соответственно аморфной и кристаллической составляющих  $\alpha$ -фазы ПВДФ. СН-полоса в ИК-спектре двухфазного ПВДФ представлена двумя пиками, каждый из которых содержит вклад  $\alpha$  (2986, 3026) и  $\beta$  (2978, 3020  $\text{см}^{-1}$ ) фаз. Как и в ряде предыдущих работ [см., например, 1, 2], нами наблюдалось увеличение содержания  $\beta$ -фазы и аморфизации  $\alpha$ -фазы при одноосном растяжении плёнки ПВДФ. Мы предположили, что влияние первого фактора может проявляться как вариации положения и ширины СН-пиков.

Для проверки этого предположения была синтезирована модель СН-полосы поглощения, позволяющая измерять частотное положение и ширину пиков при изменении концентрации в образце  $\beta$ -фазы. Для построения модельных спектров использованы четыре кривые Лоренца. Первоначально параметры кривых подбирались так, чтобы их сумма наилучшим образом описывала область СН-поглощения в спектре нерастянутой пленки. Содержание  $\beta$ -фазы при этом принималось равным 0,36 в соответствие с результатом измерения для этого образца. Затем в процессе компьютерного моделирования изменяли только концентрации  $\alpha$ - и  $\beta$ -фаз. В модельных и экспериментальных спектрах выделялась полоса в интервале 2960–3060  $\text{см}^{-1}$ , вычиталась постоянная фоновая составляющая и измерялись частотное положение максимума и ширины пиков на уровне 0.5 от максимальной интенсивности каждого из них. Характеристики СН-полосы поглощения определялись для всех образцов единообразно.

Экспериментальные данные оказались лишь в качественном согласии с модельными представлениями. При малых содержаниях  $\beta$ -фазы частоты, соответствующие максимумам пиков, явно превышают, а при больших – не достигают значений, предсказываемых модельным расчётом. Еще более серьезные противоречия модели и эксперимента выявил анализ вариаций ширины обоих СН-пиков.

Причиной несоответствия модели эксперименту может быть влияние изменения доли аморфной составляющей  $\alpha$ -фазы на ширину и частотное положение СН-пиков, которое требует специального изучения.

1. Sencadas V., Moreira V.M., Lanceros-Mendéz S., Pouzada A.S., Gregório Jr. R., *Materials Science Forum*, **514/516**, 872 (2006)
2. Морилова В.М., Евсюков С.Е., Корякова О.В., Андрейчук В.П., *Материалы конференции ВНКФ-16*, **1**, 741, (2010)

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ  
И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО И АМОРФНОГО КРЕМНИЯ  
С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ЛИТИЯ**

*Попов З.И.<sup>1\*</sup>, Фёдоров А.С.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева, г. Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, Россия

\*E-mail: zipcool@bk.ru

Развитие литий-ионных аккумуляторов в настоящее время является одной из самых актуальных задач в области источников тока. Основным материалом анодов в таких батареях является графит. При этом было показано, что теоретическая ёмкость для батарей с кристаллическим кремниевым анодом составляет величину в 10 раз большую [1]. К сожалению, увеличение объёма кристаллической решётки кремния при его интеркаливании литием (300%) ведёт к быстрой деградации материала и, соответственно, к малому количеству циклов сорбция-десорбция. Одной из возможностей обойти данную проблему является использование наноструктур из кремния (наночастицы, наносулы) покрытых аморфным кремнием [2]. Поэтому существует потребность во всестороннем изучении данных структур.

В работе при помощи квантово-химических расчётов, DFT с использованием псевдопотенциалов Вандербиля (программа VASP 4.6), оптимизирована геометрия поверхности Si (100). Показано, что атомы кремния на поверхности образуют димеры. Расчёт полной энергии полученной поверхности с добавлением атомов лития выявил, что атомы лития преимущественно будут располагаться над поверхностью кремния, с разницей энергии 0.03 эВ/атом по отношению к структуре, в которой атомы лития расположены под слоем димеров. Проведена оптимизация структуры аморфного кремния с различным содержанием абсорбированного лития до стехиометрии Li<sub>15</sub>Si<sub>4</sub>. Рассчитаны полные энергии систем и напряжения интеркаляции лития. Расчёт полной энергии промежуточных соединений SiLi<sub>x</sub> выполнялся методом демпфированной молекулярной динамики. Реакции интеркаляции лития в аморфный кремний имеет вид:



где  $y - x$  – это изменение количества ионов лития в электролите ( $y > x$ ). Среднее напряжение интеркаляции  $V$  находится по формуле:

$$V = -\frac{\Delta G_{interc}}{(y - x)F}, \quad (2)$$

где  $F$  – константа Фарадея, а  $\Delta G_{interc}$  – изменение свободной энергии Гиббса в ходе реакции. Разница полной энергии Гиббса рассчитывается по формуле:

$$\Delta G_{interc} = \Delta E_{bind} = E[\text{Li}_x\text{Si}] - E[\text{Si}] - xE[\text{Li}]. \quad (3)$$

Для структуры Li<sub>15/4</sub>Si напряжение составляет  $V(\text{Li}_{15/4}\text{Si}) = 0.32\text{В}$ , а разница полной энергии системы  $\Delta G_{interc}(\text{Li}_{15/4}\text{Si}) = -1.201\text{эВ}$ .

В результате выполнения данной работы были рассчитаны значения напряжения интеркаляции лития в аморфный и кристаллический кремний. Показано, что в процессе насыщения литием кристаллический кремний трансформируется в аморфный, при этом энергия аморфизации кремния составляет 0.319 эВ/атом.

*Работа выполнена в рамках реализации федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2010 год (П138).*

1. Kasavajjula U., Wang C.S., Appleby A.J, J. Power Sources, **163**, 1003 (2007)
2. Li-Feng Cui, Ruffo R., Chan C.K., Peng H. and Cui Yi, NanoLetters, **9(1)**, 491 (2009)

**ЗОНДОВАЯ МЁССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГРАНИЦ ЗЁРЕН  
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ Мо-О,  
ПОЛУЧЕННОЙ МЕХАНИЧЕСКИМ СПЛАВЛЕНИЕМ**

*Протасов А.В.\*, Елсуков Е.П.*

Учреждение Российской академии наук Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск, Россия

\*E-mail: protasov@fnms.fti.udm.ru

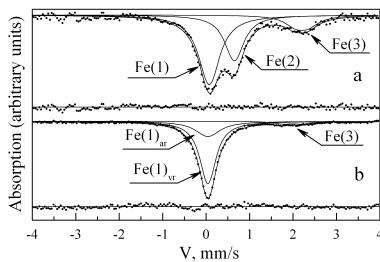


Рис. 1. Мёссбауэровские спектры образцов  $\text{Mo-O} + {}^{57}\text{Fe}$ : а -  $t_{\text{mil}} = 0,5$  ч; б -  $t_{\text{mil}} = 16$  ч.

Методами мёссбауэровской спектроскопии на примесных атомах изотопа  ${}^{57}\text{Fe}$  (1 ат.%), рентгеновской дифракции и Оже-спектрометрии изучена локализация атомов Fe в процессе механического сплавления (МС) порошкового компонента Мо с 8 ат.% О на границах зерен ОЦК Мо.

В исходном порошке Мо кислород преимущественно локализован на границах зёрен (ГЗ). МС систем Мо – О и Мо – О – Fe осуществлялось в шаровой планетарной мельнице Пульверизетта-7 в инертной среде Ar. Сосуд и шары мельницы были изготовлены из стали ШХ-15.

На рис. 1,а для образца  $t_{\text{mil}} = 0,5$  ч представлена выделенная немагнитная часть мёссбауэровского спектра, характеризующая тремя компонентами Fe(1), Fe(2) и Fe(3).

На конечной стадии измельчения при  $t_{\text{mil}} = 16$  ч в спектре присутствуют только компоненты Fe(1) и Fe(3) (рис. 1,б). Согласно [1] компонента Fe(3) с большим изомерным сдвигом ( $\sim 2$  мм/с) может быть приписана кластерам Мо – О – Fe, локализованным непосредственно в ГЗ. Компонента Fe(2), исчезающая при  $t_{\text{mil}} = 3-4$  ч при достижении  $L = 10-15$  нм, обусловлена комплексами Fe – О в ядрах дислокаций Мо, стекающих в приграничную искаженную зону (ПЗ) интерфейсов при уменьшении  $L$  с увеличением  $t_{\text{mil}}$ . Положительный изомерный сдвиг ( $\sim 0,7$  мм/с) для атомов Fe в позиции Fe(2) можно объяснить локализацией атомов Fe и О в зонах растяжения и сжатия ядра дислокаций, соответственно. Наконец, компонента Fe(1) соответствует атомам Fe, растворенным в ОЦК Мо – О как в ПЗ – Fe(1)<sub>av</sub>, так и в объёме зерна ОЦК Мо – О – Fe(1)<sub>vr</sub>. Отличие Fe(1)<sub>av</sub> и Мо – О – Fe(1)<sub>vr</sub> заключается в ширине мёссбауэровских линий 0,68 и 0,45 мм/с, соответственно (рис. 1,б).

По данным полевой ионной микроскопии ширина ГЗ  $d_{\text{ГЗ}}$  в материалах, подвергнутых интенсивной пластической деформации, не превышает 0,2 нм [2]. Оценка величины интерфейсов  $d_{\text{if}} = d_{\text{ГЗ}} \cdot [\text{Fe}(1) + \text{Fe}(2) + \text{Fe}(3)] / \text{Fe}(3)$  при  $t_{\text{mil}} \leq 2$  ч составляет 1 нм. При  $d_{\text{if}} = 1$  нм и  $L = 7$  нм ( $t_{\text{mil}} = 16$  ч) объёмная доля интерфейсов составляет  $P_{\text{if}}(\text{расч}) = 37\%$ . Из соотношения  $[\text{Fe}(1)_{\text{ПЗ}} + \text{Fe}(3)] / [\text{Fe}(1) + \text{Fe}(3)]$  для  $t_{\text{mil}} = 16$  ч получаем  $P_{\text{if}}(\text{эксп}) = 40\%$ . Наконец, при предположении равномерного распределения атомов Fe при  $t_{\text{mil}} = 16$  ч экспериментальная оценка объёмной доли ГЗ составляет  $P_{\text{ГЗ}}(\text{эксп}) = \text{Fe}(3) / [\text{Fe}(1) + \text{Fe}(3)] = 7\%$ . Расчётное значение составляет  $P_{\text{ГЗ}}(\text{расч}) = 8\%$ .

Таким образом, при рассмотрении процессов МС в металлических системах экспериментально обоснованными являются оценки ширин ГЗ и интерфейсов в 0,2 и 1 нм, соответственно. Комплексы  ${}^{57}\text{Fe} - \text{O}$  можно рассматривать в качестве зонда для изучения границ зерен порошковых нанокристаллических материалов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 10-03-00077).*

1. Колосков В.М., ФММ, 77, 6, 88 (1994)
2. Ивченко В.А. и др., ФТВД, 13, 3, 109 (2003)

## ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫЕ СВОЙСТВА СВЕРХРЕШЁТОК CoFe/Cu

*Рябова Т.А.\**, *Миляев М.А.*, *Наумова Л.И.*, *Проглядо В.В.*, *Каменский И.Ю.*

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: ryabova.t.a@yandex.ru

Магнитные металлические сверхрешётки, состоящие из чередующихся магнитных и немагнитных материалов, и обладающие эффектом гигантского магнитосопротивления (ГМС), являются интенсивно исследуемыми объектами в связи с возможностью их широкого применения в различных практических приложениях. Одним из стандартных методов воздействия, изменяющим магниторезистивные характеристики сверхрешёток, является постростовой отжиг. Проведение исследований влияния температуры на физические свойства сверхрешёток также важно для определения области их температурной стабильности.

В данной работе проведены исследования магниторезистивных свойств сверхрешёток  $N(t, \text{Å})/[\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}(15\text{Å})/\text{Cu}(23\text{Å})]_8$  в зависимости от температуры отжига. Целью исследования являлось нахождение наиболее оптимальных условий отжига, улучшающих магниторезистивные характеристики синтезированных наноструктур. Для этого на высоковакуумной установке MPS-4000-C6 были приготовлены 8 сверхрешёток, отличающихся толщиной и материалом ( $N = \text{Cr}, \text{Fe}, \text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$ ) буферного слоя. Проведённые до отжига измерения магнитосопротивления у образцов полученных сверхрешёток показали различные значения магниторезистивного эффекта и величины гистерезиса. Отжиг проводился в вакууме при давлении  $10^{-5}$  Па в течение одного часа при различных температурах в интервале от 220 °С до 420 °С. После каждого этапа отжига проводилось измерение магнитосопротивления стандартным четырёхконтактным методом при комнатной температуре.

Формула сверхрешеток	ГМС до отжига, %	ГМС после отжига, %	Оптимальная $T_{\text{отжига}}$ , °С
Si//Cr(35Å)/[CoFe(15Å)/Cu(23Å)] <sub>8</sub> /Cr(10Å)	20,8	20,6	420
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> //Cr(20Å)/[CoFe(15Å)/Cu(23Å)] <sub>8</sub> /Cr(10Å)	19,1	20,5	300
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> //Cr(17Å)/[CoFe(15Å)/Cu(23Å)] <sub>8</sub> /Cr(10Å)	12,0	13,8	270
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> //Cr(10Å)/[CoFe(15Å)/Cu(23Å)] <sub>8</sub> /Cr(10Å)	8,3	7,1	-
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> //Fe(30Å)/[CoFe(15Å)/Cu(23Å)] <sub>8</sub> /Cr(10Å)	10,3	11,7	300
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> //Fe(10Å)/[CoFe(15Å)/Cu(23Å)] <sub>8</sub> /Cr(10Å)	14,3	15,9	300
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> //CoFe(35Å)/[CoFe(15Å)/Cu(23Å)] <sub>8</sub> /Cr(10Å)	17,7	20,4	340
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> //CoFe(15Å)/[CoFe(15Å)/Cu(23Å)] <sub>8</sub> /Cr(10Å)	20,5	23,6	270

Проведённые исследования сверхрешёток показали, что отжиг по-разному влияет на их магниторезистивные свойства. Использование в качестве буфера того же материала, что и магнитный слой в сверхрешётке [CoFe/Cu], а именно  $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$ , как и слоя Cr(35Å), увеличивает температурную стабильность материала до температур 270 °С и 420 °С, соответственно. Также установлено, что у всех образцов с различными буферными слоями гистерезис почти не меняется до 320 °С, а при более высоких температурах отжига гистерезис заметно возрастает. Наибольшее увеличение магнитосопротивления (на 15 % по отношению к исходному), обусловленное отжигом образца, обнаружено в сверхрешётках с буферным слоем  $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}(15\text{Å})$ .

*Работа выполнена в рамках темы «Спин», при поддержке Программы Президиума УрО РАН (проект № 09-П-2-1037), Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект № 10-02-00590) и проекта ОФН РАН № 09-Т-2-1014.*

## СТРУКТУРА ТЕТРАЯДЕРНОГО КЛАСТЕРА $Mn_4$ В МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОМАГНЕТИКАХ

Семяняк Д.Н.<sup>1\*</sup>, Стариченко Д.В.<sup>2</sup>, Швачко Ю.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: semenyak.d@gmail.com

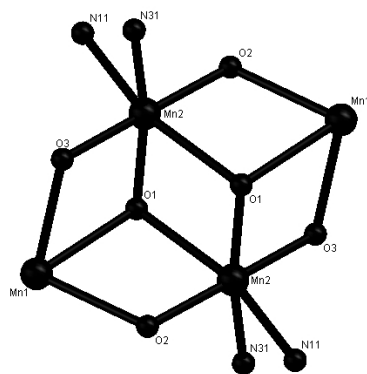


Рис. 1. Вид кластера  $Mn_4$  в  $\{[Mn_4(hmp)_6(NO_3)_2FeNO(CN)_5] \cdot 4CH_3CN\}_n$

Мономолекулярными наномангнетиками (Single Molecule Magnets) называют полиядерные металлокомплексные кластеры, в которых магнитные моменты отдельных ионов металлов связаны между собой обменными взаимодействиями, в результате которых молекулярная система приобретает свойства наномангнетита. Переход к нано- и субнано- масштабу позволяет реализовать в молекулярных наномангнетиках разнообразные спин-зависимые квантовые эффекты, представляющие большой интерес для спинтроники, квантового компьютеринга, сенсоров нового поколения [1].

В отличие от традиционных металлов и полупроводников, магнитные свойства мономолекулярного магнетика остаются неизменными даже для одного уединенного супрамолекулярного комплекса, что открывает реальную перспективу уменьшения объема функционального элемента до размеров одной молекулы [2]. Принципиально важными преимуществами являются термическая стабильность и монодисперсность. Магнитные характеристики SMM определяются структурой полиядерного кластера. В данной работе мы анализируем структуры тетраядерных кластеров серии мономолекулярных магнетиков на основе  $Mn_4$ . В кластере, представленном на Рис. 1, два иона  $Mn(III)$  связаны между собой и с двумя ионами  $Mn(II)$  кислородными мостиками. Ионы  $Mn(III)$  находятся в симметричных искаженных октаэдрах, структура которых определяет магнитную анизотропию всего SMM. Эта структура обусловлена Ян-Теллеровскими искажениями и пространственной геометрией гидроксиметил-пиридиновых (hmp) лигандов.

Главные оси октаэдров соседних  $Mn(III)$  антипараллельны и имеют излом в позиции металла, так что угол  $N1 - Mn2 - O1$  в структурах с нитропруссидным противоионом  $\{[Mn_4(hmp)_6(NO_3)_2FeNO(CN)_5] \cdot 4CH_3CN\}_n$  составляет  $160^\circ$ . Сегменты Ян-Теллеровской оси составляют  $2.239 \text{ \AA}$  и  $2.191 \text{ \AA}$  для связей  $Mn - O1$  и  $Mn - N1$ , соответственно. Отметим, что квадратное основание октаэдра также искажено за счет азота  $N31$  пиридина. Длина связи  $Mn - N31$   $2,035 \text{ \AA}$  существенно превышает длины остальных трех связей  $Mn - O$ , лежащих в интервале  $1.87 - 1.945 \text{ \AA}$ , так что основание в некотором смысле можно считать ромбическим. В работе проведен детальный анализ длин связей и углов в кластерах  $Mn_4$  серии наномангнетиков, полученных и исследованных в работах [3-5]. Показано, что изменение внутри- и межмолекулярных магнитных взаимодействий от антиферромагнитного до ферромагнитного не связано с систематическим изменением какого-либо выделенного структурного параметра кластера.

*Работа поддержана грантами 09-T-2-1014 и 09-M-23-2006 Президиума РАН.*

1. Bogani L. et al., Nature Materials, 7, 179 (2008)
2. Bogani L. et al., J.Mater.Chem., 18, 4750 (2008)
3. Miyasaka H., et al., JACS 9, 128, No.11, 3770 (2006)
4. Kushch L. et al., Book of abstracts V Int. Conf. "High-Spin Molecules and Molecular Magnets", N.Novgorod, Russia, September 4-8, 2010, O17
5. Shvachko Yu. et al., *ibid.*, O30

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ЗВУКА В МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ НА ОСНОВЕ АКУСТОМАГНИТНОГО ЭФФЕКТА

*Стороженко А.М.*

Юго-Западный государственный университет, г. Курск, Россия

\*E-mail: storogenko\_s@mail.ru

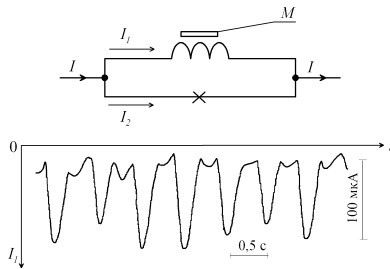


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки для определения скорости звука.

Магнитные жидкости (МЖ) относятся к числу первых активно используемых наноматериалов и представляют собой коллоидный раствор наночастиц магнетита, покрытых слоем стабилизирующего вещества, в жидкости-носителе, в данном случае – керосине. В настоящей работе выполнены исследования скорости распространения звука в (МЖ), помещённой в неоднородное магнитное поле на основе акустомагнитного эффекта (АМЭ). Рассматриваемая в работе методика исследования является базой для анализа физических параметров наночастиц дисперсной фазы на основе исследования такого структурочувствительного параметра как скорость звука. Сущность АМЭ заключается в излучении электромагнитной волны столбиком намагниченной МЖ при распространении в нем звуковых волн [1].

На рис. 1 приведена блок-схема экспериментальной установки. Сигнал с генератора звуковых колебаний 1 поступает параллельно на частотомер 2, вольтметр 3 и пьезопластинку 4. Проходя через столбик МЖ 5, звуковой сигнал образует стоячую волну. Сигнал снимается катушкой индуктивности 6, закреплённой на кинематическом узле катетометра 11, и поступает на селективный усилитель 7, затем параллельно на осциллограф 8 и аналого-цифровой преобразователь 9, соединённый с компьютером 10. В среде NI LabView осуществляется фильтрация полученного сигнала, разложение его в спектр для контроля уровня помех, определение частоты и амплитуды АМЭ. МЖ заполняет стеклянную трубку 12, находящуюся между полюсами постоянного магнита 13.

При проведении исследований используется методика звукового интерферометра. При перемещении катушки индуктивности вдоль оси трубы на экране осциллографа наблюдаются периодически чередующиеся максимумы и минимумы амплитуды принимаемого сигнала, соответствующие пучностям и узлам стоячей волны. Измеряя координаты верхнего и нижнего максимумов  $Z_u$  и  $Z_d$ , и фиксируя число полуволн  $N$ , можно вычислить длину волны звука по формуле  $\lambda = 2(Z_u - Z_d)/N$ . Зная частоту  $\nu$  вводимых в систему звуковых колебаний, можно рассчитать скорость звука  $c$  в МЖ по формуле  $c = \lambda\nu$ . Погрешность определения скорости звука в МЖ не превосходит 1%.

В предложенной недавно теоретической модели [2] делается вывод об определяющем влиянии фактора неоднородности магнитного поля на скорость звука в МЖ. По результатам измерений была получена экспериментальная зависимость скорости звука от градиента напряжённости магнитного поля, но корреляция между указанными параметрами не наблюдается, что противоречит выводам вышеупомянутой модельной теории.

1. Полунин В.М., Акустические эффекты в магнитных жидкостях, Физматлит (2008)
2. Одинаев С., Комилов К., Акустический журнал, **54**, 920 (2008)



**ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ЭЛЕКТРОНОВ УГЛЕРОДНЫХ  
ЗИГЗАГООБРАЗНЫХ НАНОТРУБОК ОТ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ**

*Судоргин С.А.<sup>1\*</sup>, Лебедев Н.Г.<sup>1</sup>, Белоненко М.Б.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Россия

<sup>2</sup>Волгоградский Институт Бизнеса, г. Волгоград, Россия

\*E-mail: sergsud@mail.ru

В работе в рамках квазиклассического приближения времени релаксации получено выражение для коэффициента диффузии электронов в зигзагообразных полупроводниковых нанотрубках в присутствии электрического поля. Электронная подсистема углеродных нанотрубок рассматривается в  $\pi$ -электронном приближении и описывается хорошо известным дисперсионным соотношением [1]. Энергию электрона в одномерном случае можно представить в виде ряда Фурье:

$$\varepsilon_s(\mathbf{p}) = - \sum_{m,s} A_{ms} \cos\left(\frac{m p_x d}{\hbar}\right), \quad (1)$$

где  $p_x$  – параллельная оси нанотрубки компонента квазиимпульса,  $s$  – нумерует квантование компоненты импульса по окружности нанотрубки,  $A_{ms}$  – коэффициент разложения в ряд Фурье дисперсионного соотношения электронов.

Функция распределения электронов  $f(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  находится из кинетического уравнения Больцмана с интегралом столкновений в  $\tau$ -приближении [2]:

$$\hat{L}_p f_s + \text{div}(f_s \mathbf{v}_s) = \frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau}, \quad \hat{L}_p = - \frac{d p}{d t} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{1}{\tau}, \quad (2)$$

$f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  – функция распределения Ферми,  $\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \partial \varepsilon(\mathbf{p}) / \partial \mathbf{p}$  – скорость электрона в зоне Бриллюэна.

В приближении «среднего электрона» выражение для коэффициента диффузии:

$$D(E) = \sum_s \int_{-\pi}^{\pi} f_{0s}(p_x, x) \sum_m A_{ms} m \sum_{m'} A_{m's} m' \cdot \left\{ \frac{E^2(m^2 + m'^2) + 1}{[E^4(m^2 - m'^2)^2 + 2E^2(m^2 + m'^2) + 1] [E^2 m^2 + 1]} \cdot [E m (\cos(m p_x) \sin(m' p_x) + \cos(m p_x + m' p_x)) + \sin(m p_x) \sin(m' p_x) + \sin(m p_x + m' p_x)] + \right. \quad (3)$$

$$+ \frac{E^3(m'^3 - 2m^2 m') + E m'}{[E^4(m^2 - m'^2)^2 + 2E^2(m^2 + m'^2) + 1] [E^2 m^2 + 1]} [\cos(m p_x) \cos(m' p_x) - E m \sin(m p_x) \cos(m' p_x)] +$$

$$\left. + \frac{[\sin(m' p_x) + E m \cos(m' p_x)] [\sin(m p_x) + 2E m \cos(m p_x) - E^2 m^2 \sin(m p_x)]}{[E^2 m^2 + 1] [E^2 m'^2 + 1]} \right\} d p_x.$$

*Работа проведена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы (Государственный контракт № П892), поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 08-02-00663).*

1. Харрис П., Углеродные нанотрубки и родственные структуры, Техносфера, (2003)
2. Булыгин А.С., Шмелев Г.М., Маглеванный И.И., ФТТ, **41**, 1314 (1999)

## МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ НАНОДИСПЕРСНЫХ МАГНИТНЫХ КОЛЛОИДОВ

Елфимова Е.А.<sup>1</sup>, Ефимова В.А.<sup>1</sup>, Иванов А.О.<sup>1</sup>, Кэмп Ф.<sup>2</sup>, Турьшева Е.В.<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Уральский госуниверситет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>School of Chemistry, University of Edinburgh, Edinburgh, UK

\*E-mail: tais\_kat@list.ru

Настоящая работа посвящена определению начальной магнитной восприимчивости концентрированных нанодисперсных магнитных коллоидов (магнитных жидкостей, феррожидкостей), которые представляют собой устойчивые взвеси наноразмерных частиц ферро- и ферромагнитных материалов в жидкостях носителях. Характерный диаметр магнитных ядер частиц имеет порядок 10 нм, а форма их близка к сферической. С фундаментальной точки зрения физики жидкостей, принципиальной особенностью феррожидкостей является определяющая роль межчастичных взаимодействий магнитной природы. В феррожидкостях магнитно-дипольные силы приводят к весьма большому в сравнении с другими жидкостями, значениям магнитной восприимчивости.

В экспериментальных работах [1] было установлено, что увеличение концентрации феррожидкости ведет к значительным отклонениям начальной магнитной восприимчивости от закона Ланжевена  $\chi_L = nm^2/3kT$ . ( $\chi_L$  – значение Ланжевена,  $n$  – концентрация,  $m$  – магнитный момент,  $kT$  – тепловая энергия) Эти различия объясняются присутствием многочастичных корреляций, которые играют важную роль в концентрированных феррожидкостях. Учет многочастичных корреляций для описания свойств магнитной жидкости был сделан в работе [2], в которой выражение для начальной магнитной восприимчивости определено с точностью до  $\chi_L^3$ :

$$\chi = \chi_L \left( 1 + \frac{4\pi\chi_L}{3} + \frac{4\pi\chi_L}{75}\lambda^2 + \frac{(4\pi\chi_L)^2}{144} \right), \quad (1)$$

где  $\lambda = m^2/d^3kT$  параметр диполь-дипольного взаимодействия, имеющий смысл отношения магнитной энергии двух контактирующих частиц к тепловой;  $d$  – диаметр частицы.

В настоящей работе было рассчитано дополнительное слагаемое порядка  $\chi_L^3\lambda$ , уточняющее формулу начальной магнитной восприимчивости (1):

$$\chi = \chi_L \left( 1 + \frac{4\pi\chi_L}{3} + \frac{4\pi\chi_L}{75}\lambda^2 + \frac{(4\pi\chi_L)^2}{144} + \left( \frac{\ln 2}{120} - \frac{1187}{72000} \right) (4\pi\chi_L)^2\lambda \right). \quad (2)$$

Сравнение теоретических результатов с данными компьютерного моделирования показало, что формула (2) точно описывает начальную магнитную восприимчивость высококонцентрированных феррожидкостей (объемная концентрация феррочастиц  $\sim 30\%$ ) при значении параметра  $\lambda \sim 1-2$ , тогда как формула (1) является точной только в области объемных концентраций до 20%.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 08-02-00647, гранта АВЦП № 2.1.1/1535, ФАНИ г/к 02.740.11.0202 и гранта Президента МК-1673.2010.2.*

1. Pshenichnikov A.F., Lebedev A.V., Low-temperature susceptibility of concentrated magnetic fluid, J. Chem. Phys., **121**, 5455-5467 (2004)
2. Ivanov A.O., Kuznetsova O.B., Magnetic properties of dense ferrofluids: An influence of interparticle correlations, Phys. Rev. E., **64**, 041405-1–12 (2001)

## ОДНОСТЕННАЯ ЗОЛОТАЯ НАНОТРУБКА (5,3) В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Филиппова Е.Р., Миронов Г.И.

Марийский государственный университет, г. Йошкар-Ола, Россия

\*E-mail: 31aisha1986@rambler.ru

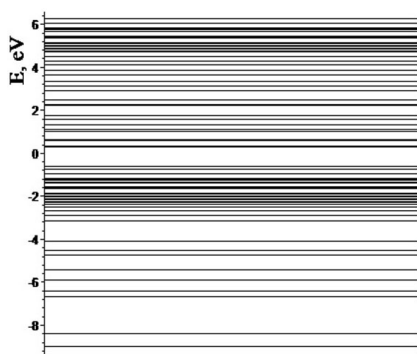


Рис. 1. Энергетический спектр наносистемы при  $U = 7\text{eV}$ ,  $B = -1(\text{eV})^{-1}$ ,  $\varepsilon = -U/2$ .

Наноструктуры из атомов золота как природные, так и синтезированные открывают широкие возможности для применения в наноструктурном материаловедении [1], наноэлектронике [2], катализе [3]. В работе [4] сообщается об экспериментальном синтезе длинных одностенных золотых нанотрубок с хиральностью (5,3) с диаметром около 2 нм с помощью УНВ-ТЕМ при 150 К. Мотивом синтеза таких структур являлась миниатюризация электронных устройств.

С использованием метода функций Грина в рамках модели Хаббарда был проведён теоретический расчёт для одностенной золотой нанотрубки хиральности (5,3), состоящей из  $N=50$  атомов золота. Вычислены термодинамические характеристики системы и построен энергетический спектр.

Гамильтониан нашей системы будет иметь вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \varepsilon \sum_{i=1}^{50} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{i \neq j, \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}), \quad \hat{V} = U \sum_{i=1}^{50} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$

где  $\varepsilon$  – собственная энергия электрона,  $B$  – интеграл переноса, описывающий перескоки электрона с узла на узел,  $U$  – энергия кулоновского отталкивания электронов, оказавшихся на одном узле,  $n_{i\uparrow} = a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow}$  – оператор числа частиц,  $a_{i\uparrow}^+$  и  $a_{i\uparrow}$  – операторы рождения и уничтожения частиц на узле  $i$  нанотрубки с проекцией спина  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ .

Записав уравнения движения для операторов рождения частиц для всех узлов нанотрубки, решив получившиеся операторные уравнения в приближении статических флуктуаций [5], мы вычислили антикоммутаторные функции Грина, которые содержат практически всю информацию физико-химических свойствах наносистемы в рамках модели Хаббарда. В фурье - образе антикоммутаторной функции Грина числители соответствующих выражений определяют вероятности нахождения электронов на том или ином энергетическом уровне (кратности вырождения соответствующих уровней энергии), полюса функций Грина определяют энергетический спектр рассматриваемого нанокластера. Энергетический спектр представлен на рис. 1.

1. Whetten R.L., Crystal Structures of Molecular Gold Nanocrystal Arrays, **5**, 397-406 (1999)
2. Templeton A.C., Wuelfing W.P., Monolayer-Protected Cluster Molecules, **1**, 27-36 (2000)
3. Hutchings G.J., New Directions in Gold Catalysis, **1-2**, 3-11 (2004)
4. Oshima Y., Onga A. and Takayanagi K., Helical gold nanotube synthesized at 150 K, **91**, 205503 (2003)
5. Миронов Г.И., Вычисление функций Грина для наноструктур в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций, **6**, 611-620 (2006)

**РОЛЬ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ОРГАНИЗАЦИЮ СИНТЕЗИРОВАННЫХ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ НАНОКЛАСТЕРОВ МЕДИ***Чепкасов И.В.*

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

E-mail: ilya\_chepkasov@mail.ru

В данной работе была проведена компьютерная имитация процессов синтеза наночастиц меди и их дальнейшей обработки. В качестве имитируемого метода получения сверхмелкодисперсных материалов был выбран метод конденсации из газовой фазы, так как данный метод играет важную роль при промышленном производстве различных наноматериалов [1]. С использованием такого рода синтеза теоретически возможно производство наночастиц с контролируемым химическим составом, степенью дефектности, внутренней структурой и фиксированным распределением кластеров по размеру. Поэтому на первом, предварительном этапе моделировались процессы конденсации наночастиц меди из высокотемпературной газовой фазы с целью физически и технологически корректного представления компьютерного образа синтезированных наночастиц. На втором, основном этапе исследований имитировались способы термической обработки полученных из газовой фазы кластеров с целью нахождения основных закономерностей теплового воздействия.

Начальной точкой конденсации была конфигурация, содержащая 85000 атомов Cu, распределенных в простой кубической решетке с параметром решетки  $15 a_B$ , где  $a_B$  – радиус Бора. Начальная скорость атомов соответствовала случайному распределению Максвелла - Больцмана при начальной температуре  $T_i = 1000$  К.

На втором этапе исследований изучалась эволюция структуры и внешней формы наночастиц Cu, полученных методом свободной конденсации из высокотемпературной газовой среды под влиянием кратковременного термического воздействия. Для этого был смоделирован постепенный нагрев от  $T = 77$  К до  $T = 1200$  К образующихся при конденсации наночастиц. Температура в процессе моделирования определялась посредством средней кинетической энергии атомов, которая рассчитывалась на основе скоростного алгоритма Верлета [2] с шагом по времени  $h = 2$  фс.

На основе проведенного компьютерного анализа процессов нагрева синтезированных из высокотемпературной газовой фазы кластеров меди можно сделать вывод, что температура агломерации частиц имеет достаточно большое значение. Если процесс объединения происходил на начальных стадиях развития системы, то наличие высокой температуры окружающей среды приводило к соединению первичных кластеров в практически единое целое. Если же процесс агломерации происходил при низких температурах, то кинетической энергии столкновения оказывалось уже недостаточно для объединения и происходило «слипание» кластера за счет сил межатомного взаимодействия.

Для того, чтобы иметь возможность получения в больших количествах сферичных металлических наночастиц с единой кристаллической структурой, необходимо ограничить температуру охлаждения газовой смеси величиной порядка 400-500 К. Если же использовать в качестве охлаждения широко применяемый сейчас жидкий азот, то будет образована значительная фракция слабосвязанных между собой икосаэдрических кластеров, которые при повышении температуры сформируют червеобразные кластеры, с сегментами разных кристаллических структур.

*Представляемая работа была выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, номер гранта 09-02-98000-р\_сибирь\_a и гранта Президента РФ, номер МК-2207.2009.2.*

1. Ohno T., Journal of Nanoparticle Research, 4, 255 (2002)
2. Tao Pang, An introduction to computational physics, University Press, Cambridge (2006)

## ОПТИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ КИНЕТИКО-ПРОЧНОСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ МАГНИТОЖИДКОСТНОЙ МЕМБРАНЫ

*Шабанова И.А.*

Юго-Западный государственный университет, г. Курск, Россия

\*E-mail: Irina-a-sh@mai.ru

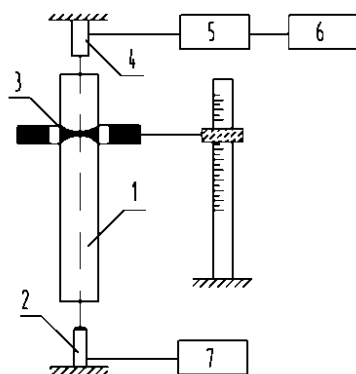


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки для определения времени существования отверстия: 1- стеклянная трубка, 2-лазерный модуль, 3- МЖП, 4- фотодиод, 5- АЦП, 6- компьютер, 7- импульсный генератор

Магнитожидкостная мембрана (МЖМ) представляет собой магнитожидкостную перемычку (МЖП), перекрывающую сечение стеклянной трубки благодаря стабилизирующему действию неоднородного магнитного поля коаксиально расположенного кольцевого магнита. При наличии в трубке доньшка МЖП изолирует находящуюся под ней воздушную полость, ее смещение от первоначального положения вдоль трубки приводит к возникновению в газовой полости перепада давления. По достижении критического перепада давления происходит разрыв МЖП с образованием отверстия по центру. Особенностью МЖМ является их самовосстановление после разрыва, сопровождающегося испусканием акустического и электромагнитного импульсов [1].

В работе представлены результаты исследования наиболее существенных кинетико-прочностных параметров МЖМ – диаметра  $D$  и времени существования отверстия  $\tau$  в МЖП путём прямых измерений при использовании оптических методов. Экспериментальное определение времени существования отверстия в МЖМ осуществляется в установке, блок-схема которой представлена на рис. 1. Основные характеристики образцов МЖ и результаты определения  $D$  и  $\tau$ , полученные для МЖМ в режимах расширения и сжатия изолированной газовой полости, представлены в таблице:

Образец	Состав жидкости	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$\varphi$ , %	$\eta_s$ , Па·с	Расширение газовой полости		Сжатие газовой полости	
					$D$ , мм	$\tau$ , мс	$D$ , мм	$\tau$ , мс
МЖ-1	магнетит в керосине,	1190	9	$2,3 \cdot 10^{-3}$	0,76	15,0	0,55	7,8
МЖ-2	стабилизатор –	1440	14,5	$5,4 \cdot 10^{-3}$	0,75	37,8	0,53	31,2
МЖ-3	олеиновая кислота	1022	5	$1,1 \cdot 10^{-3}$	1,13	18,7	0,97	13,2

Наибольшее время жизни отверстия имеет МЖМ на основе МЖ-2, характеризующейся наибольшей вязкостью. По-видимому, вязкость жидкости способствует замедлению течения, как в процессе образования отверстия, так и при его захлопывании. Для менее концентрированных образцов МЖ диаметр отверстия больше, чем для более концентрированных, что объясняется лучшим взаимодействием концентрированных образцов с магнитным полем.

*Исследования выполнены при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (грант НК-410П), АБЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (Тематический план ФАО 2009-2010, тема № 1.8.09).*

1. Полунин В. М., Акустические эффекты в магнитных жидкостях, ФИЗМАТЛИТ (2008)

**ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В РАСТВОРЕ БЕНЗОЛА***Шамина Е.Н.<sup>1\*</sup>, Лебедев Н.Г.<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Волгоградский государственный медицинский университет, г. Волгоград, Россия<sup>2</sup>Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Россия

\*E-mail: hellena\_81@rambler.ru

В работе представлены результаты расчёта энергетических характеристик процессов адсорбции молекулы бензола на однослойных углеродных нанотрубках. Расчёты электронного строения выполнены в рамках модели молекулярного кластера с использованием квантово-химической полуэмпирической схемы MNDO [1].

Изучены однослойные нанотрубки (n, n) типа (n = 5, 6). В качестве геометрических моделей нанотрубок выбраны кластеры (фрагменты), содержащие n шестиатомных циклов (гексагонов) по периметру трубки и 8 - 10 элементарных слоев гексагонов вдоль оси трубки. Граничные химические связи на концах замыкались атомами водорода [2].

Рассмотрены три варианта ориентации молекулы бензола над поверхностью углеродной нанотрубки (УНТ): I) над центром гексагона (плоскость молекулы перпендикулярна плоскости гексагона); II) над центром гексагона (плоскость молекулы параллельна плоскости гексагона); III) плоскость молекулы бензола параллельна плоскости нанотрубки. В каждом из трёх случаев молекула располагалась в центре кластера, чтобы уменьшить влияние граничных условий.

Анализ результатов квантово-химических расчётов показал, что в полуэмпирическом методе энергия верхней заполненной молекулярной орбитали ( $E_{ВЗМО}$ ) увеличивается с ростом диаметра трубки, а энергия нижней вакантной молекулярной орбитали ( $E_{НВМО}$ ) уменьшается с ростом диаметра трубки. Изменение величин граничных энергий свидетельствует об изменении свойств УНТ в результате адсорбции, в данном случае, об увеличении реакционной способности систем.

Анализ длины адсорбционных химических связей показал, что в случаях (I) и (III) между молекулой бензола и атомами углерода УНТ образовались только водородные связи. А в случае (II) образовалась ковалентная химическая связь типа 6+6 между атомами углерода молекулы и трубки. Последний случай представляется маловероятным, поскольку для образования одновременно 6 связей нужна единственно возможная взаимная ориентация частиц, стерический фактор которой в растворе очень низок по сравнению с другими вариантами.

Во всех случаях расчёты дают положительные энергии адсорбции, свидетельствующие о переходе системы в энергетически менее выгодное состояние.

Анализ результатов показал, что вследствие адсорбции молекулы бензола ширина запрещённой зоны нанотрубки слабо увеличивается. Это косвенно приводит к незначительному изменению физических свойств УНТ, в частности, проводимости и прозрачности. Этот эффект можно использовать для разработки химических сенсоров [3], направленных на регистрацию рассмотренных в работе частиц, и создания оптически активных сред на основе растворов УНТ в бензоле.

1. Степанов Н.Ф., Квантовая механика и квантовая химия, Мир, (2001)
2. Шамина Е.Н., Лебедев Н.Г., Научно-технические ведомости СПб ГПУ. Серия «Физико-математические науки», 77/2, 99–104 (2009)
3. Эггинс Б., Химические и биологические сенсоры, Техносфера (2005)

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КАРБИНОВЫХ НАНОТРУБОК И КАРБИНОФУЛЛЕРЕНОВ

*Шахова И.В.*

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

\*E-mail: silent\_mirage@mail.ru

Каркасные углеродные наноструктуры – фуллерены и нанотрубки, сформированы из углеродных слоев за счёт включения в них топологических дефектов [1,2]. Из графеновых слоев получают обычные нанотрубки и фуллерены, а из графиновых слоев, состоящих из  $sp + sp^2$  гибридных атомов – графиновые каркасные наноструктуры [3]. Теоретически исследованные графиновые нанотрубки и фуллерены состоят из  $sp$  и  $sp^2$  атомов, количество которых сопоставимо. Вопрос о том, возможно ли формирование каркасных наноструктур, состоящих преимущественно из  $sp$  гибридных атомов, остаётся не изученным. В данной работе выполнен теоретический анализ возможной структуры карбиноидных слоев и нанотрубок. Рассчитана геометрически оптимизированная структура фрагментов слоев, нанотрубок и карбинофуллеренов. Рассчитаны энергетические характеристики карбиноидных наноструктур. Расчёт геометрически оптимизированной структуры карбиноидных слоев, фуллеренов и нанотрубок из них был выполнен методом молекулярной механики ММ+, энергетические характеристики вычисляли полуэмпирическим квантово-механическим методом РМЗ.

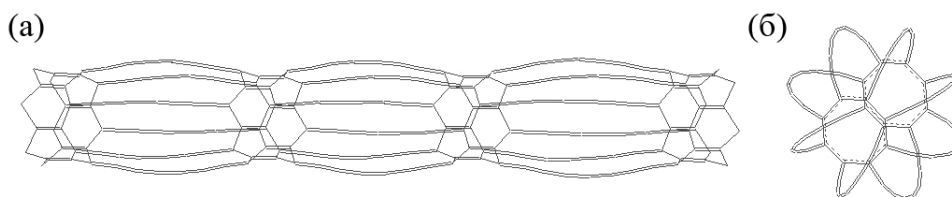


Рис. 1. а) Карбиноидная нанотрубка; б) Карбинофуллерен

На первом этапе была рассчитана геометрически оптимизированная структура карбиноидных слоев, состоящих из карбиновых цепочек, сшитых  $sp^2$  гибридными атомами углерода. Установлено, что карбиноидные слои могут быть двух основных разновидностей: слои, в которых  $sp^2$  гибридные атомы образуют гексагоны и слои, где  $sp^2$  атомы не образуют гексагонов. Причём каждая из слоевых разновидностей может иметь как периодически упорядоченную, так и не упорядоченную структуру. На втором этапе получали карбиноидные нанотрубки путём сворачивания карбиноидных слоев ограниченного поперечного размера и сшивки их в каркасные трубчатые структуры при помощи углеродных атомов в состоянии  $sp^2$  гибридизации. Анализ возможности формирования карбиноидных нанотрубок был выполнен в результате расчёта полной энергии связей элементарных ячеек карбиноидных слоев и карбиноидных нанотрубок, полученных из этих слоев. Установлено, что энергия трубок, в состав которых входит 6 и меньше карбиновых цепочек, больше, чем энергия развёрнутого листа, из которого данные трубки получены. Начиная с трубок, в поперечном сечении которых содержится 7 и более карбиновых цепочек, более энергетически выгодными становятся свёрнутые трубки, по сравнению с карбиноидными слоями. Именно такие карбиноидные нанотрубки должны устойчиво существовать и могут быть экспериментально синтезированы.

1. Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C., Curl R.F., Smalley R.E., Nature, **318**, 162-163 (1985)
2. Iijima S, Nature, **354** (6348), 56–64 (1991)
3. Беленков Е.А., Известия ЧНЦ, **1**, 17-21 (2002)





# **БИОФИЗИКА**



**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ  
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ЦЕЛЕНТЕРАЗИНА  
И ЕГО ИЗОМЕРНЫХ ФОРМ**

*Антипина Л.Ю.<sup>1,2\*</sup>, Томилин Ф.Н.<sup>1</sup>, Овчинников С.Г.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Сибирский государственный аэрокосмический университет, г. Красноярск, Россия

\*E-mail:

Целентеразин (CLZ) является субстратом биолюминесцентной реакции  $\text{Ca}^{2+}$ -регулируемых фотопротеинов. В настоящее время биолюминесцентные фотопротеины являются основой многих широко используемых методов анализа для мониторинга внутриклеточных процессов и загрязнения окружающей среды, а также в медицинской диагностике. Ранее в работе Кормиера и др. было предположено, что в различных растворителях в зависимости от полярности окружения целентеразин находится в различных изомерных формах: CLZ(1H), CLZ(2H), CLZ(7H). Апротонные растворители сдвигают спектр абсорбции в красную область (454 нм) в отличие от протонных растворителей – 435 нм. Различные абсорбционные максимумы были приписаны различным таутомерным формам целентеразина.

Формы CLZ(1H) и CLZ(7H) геометрически очень похожи, поэтому экспериментально сложно определить, какая именно структура находится в белке. Однако так как данная структура является эммитером флуоресцентной реакции, то знание точной геометрии структуры становится особенно важным. Даже небольшие изменения в атомной структуре приводят к достаточно большим сдвигам в спектрах поглощения. В данной работе методами квантовой химии исследованы изомерные формы CLZ с помощью одноэлектронных приближений (метод Хартри-Фока) и с учетом корреляционных поправок (конфигурационное взаимодействие, метод DFT B3LYP, теория возмущений Меллера-Плессета MP2). Было проведено сравнение длин связей и энергетические параметры для трёх структур CLZ. Из сравнения полученных данных можно сделать вывод, что начальной структурой процесса будет являться структура CLZ(1H), а не CLZ(7H), как считалось ранее.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (07-04-00930-а), программы Президиума РАН «Молекулярная и клеточная биология» и программы Сибирского отделения РАН (проект № 2), в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2010 год (П333 и П213).*

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ УЕДИНЁННЫХ ВОЛН  
В СПИРАЛЬНОЙ МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЦЕПОЧЕК ДНК***Хамзин С.Р., Закирьянов Ф.К.*Башкирский государственный университет, г. УФА, Россия  
E-mail: ShKlim@yandex.ru, Farni@rambler.ru

На основе метода молекулярной динамики была разработана программа для исследования физических аспектов взаимосвязи функциональных свойств ДНК и первичной структуры молекулы [1]. Целью работы является получение и исследование нелинейных уединенных волн на трехмерной дискретной математической модели молекулы ДНК В-формы с учетом реальной последовательности азотистых оснований.

Гамильтониан двойной цепочки для данной модели молекулы ДНК можно записать в виде:

$$H_{model} = H_{nucl} + H_{bases}$$

Первое слагаемое  $H_{nucl}$  описывает гамильтониан двойной спирали через энергии движения и взаимодействия отдельных нуклеотидов. Гамильтониан  $H_{bases}$  отвечает за взаимодействие азотистых оснований между собой в цепочках.

Структура предлагаемой модели построена таким образом, что учитывается квазипериодическая химическая структура молекулы ДНК. Каждая цепочка двойной спирали состоит из мономеров, соответствующих расположению нуклеотидов. Каждый узел биополимера может совершать поперечные, продольные и угловые смещения относительно положения равновесия, при этом учитывается спиральность молекулы ДНК. Наряду с этим учитывается взаимодействие азотистых оснований как отдельных звеньев в цепи, и их взаимодействие с сахаро-фосфатными группами. Это взаимодействие характеризуется поворотом сахаро-фосфатной группы (относительно положения равновесия) и поворотом азотистых пар оснований. Таким образом, мы учитываем в трехмерной модели движения нуклеотида, как целого звена цепи, так и азотистых оснований, входящих в состав нуклеотида.

Решение задачи сводится к решению уравнения  $\sin$ -Гордона, в рамках данной модели оно описывает целый ряд внутримолекулярных подвижностей: вращения валентных углов, сжатие или растяжение валентных связей, пространственные изгибы и кручения молекулы [2, 3]. В ходе численного исследования решалась система дифференциальных уравнений второго порядка (задача Коши), поиск решения проходил в виде бегущей волны.

По результатам работы можно делать выводы о возможности существования уединенных волн в полностью неоднородной нелинейной системе, причем данные нелинейные возбуждения распространяются на расстояния, достаточные для того, чтобы быть значимыми для физических (или биологических) процессов. Численный эксперимент показал, что в данной спиральной модели ДНК существует, по крайней мере, четыре типа устойчивых топологических солитонов в дозвуковом диапазоне скоростей, волны имеют форму кинка с амплитудой  $2\pi$ , волна проходит полностью весь ген без потерь энергии и не меняет свою форму. Получена зависимость энергии топологических солитона от скорости волны и параметров цепи.

1. Якушевич Л.В., Нелинейная физика ДНК, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика» (2007)
2. Савин А.В., Высокмолекулярные соединения. Сер. А., **41**, 1416-1425 (1999)
3. Savin A.V., Manevitch L.I., Physical Review E, **61**, 7065–7075 (2000)

## Fe@C НАНОКОМПОЗИТЫ И ВОЗМОЖНОСТИ ИХ ТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

*Шаропова В.А.<sup>1</sup>, Бызов И.В.<sup>1</sup>, Тюменцева Н.В.<sup>2</sup>, Мысик А.А.<sup>1</sup>, Уймин М.А.<sup>1</sup>, Юшков Б.Г.<sup>2</sup>,  
Ермаков А.Е.<sup>1\*</sup>*

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

<sup>2</sup>Институт иммунологии и физиологии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: yermakov@imp.uran.ru

Fe@C наноконпозиты являются перспективными терапевтическими агентами, но ключевым остается вопрос о взаимодействии таких частиц с клетками и субклеточными структурами и их устойчивости по отношению к биологическим средам, например, крови. Подавляющее большинство работ по гипертермии проводится с применением оксидов железа. Для обеспечения стабильности и снижения токсичности эти наночастицы часто покрывают декстраном и другими покрытиями, которые не всегда выполняют желаемую функцию. Использование капсулированных в углерод наночастиц металлов может обеспечить высокую структурную стабильность наноконпозитов при взаимодействии с окружающей средой и биологическими объектами. Также можно ожидать, что в результате инертного химического покрытия частицы потенциально могут быть биосовместимыми и малотоксичными.

Для увеличения стабильности дисперсных систем в фармакологии используют вспомогательные вещества на основе биосовместимых поверхностно-активных веществ. В настоящее время одно из наиболее активно развивающихся направлений – использование для этих целей липосом. Их способность включать в себя самые разные вещества практически без каких-либо ограничений в отношении их химической природы, свойств и размера молекул даёт уникальные возможности для повышения терапевтической эффективности и гипертермии, поскольку, с одной стороны, препарат, находящийся в липосоме, защищен ее мембраной от действия неблагоприятных факторов, а с другой – та же мембрана не позволяет токсичному препарату превысить допустимую концентрацию в биологических жидкостях организма.

В данной работе было впервые изучено тепловыделение в суспензиях наночастиц Fe@C и стабильность суспензий с липосомальной формой среды-носителя.

Нанопорошки Fe@C получали методом газофазного синтеза: сильно перегретая капля железа испарялась в среде буферного газа (Ar), содержащего бутан. Размер частиц оксидов железа контролировался давлением аргона и скоростью его протекания вблизи зоны испарителя. В результате получали частицы железа, покрытые слоем углерода толщиной 2-5 нм. В качестве липосомальной формы был использован соевый лецитин. Суспензии наночастиц готовили путем ультразвуковой обработки смеси, содержащей металл-углеродные частицы (1 – 10 г/л) и вспомогательное вещество (3 – 30 г/л) в среде 199 или в физиологическом растворе. Для оценки стабильности, суспензию вводили лабораторным мышам внутривенно в количестве 0.5 мл однократно. Распределение наночастиц по внутренним органам мышей контролировалось по величине магнитной восприимчивости каждого органа, измеренной на весах Фарадея. Выяснилось, что распределение не зависит от количества введенного препарата. Частицы не выводятся из органов ретикулярной системы в течение, по крайней мере, 2 месяцев. Такое поведение, вероятно, обусловлено большим размером агрегатов, а также отсутствием сильного взаимодействия молекул фосфолипидов с поверхностью частиц (при попадании в клетку ведут себя независимо). Основной вывод заключается в том, что соевый лецитин малопримогден в качестве вспомогательного вещества для этих целей. Дальнейшая работа по стабилизации наночастиц будет направлена на использование в качестве покрытия производных полиэтиленгликоля.

## Авторский указатель

Weber H.W., 94

Абдуллаев Х.Х., 191  
Агзамова П.А., 123  
Ананьева Ю.Е., 211  
Андбаева В.Н., 185, 198  
Андреев С.В., 41, 52  
Андрюшин К.П., 77, 191  
Андрюшина И.Н., 191  
Анисимов В.И., 46, 114  
Анисимов М.А., 135, 136  
Антипина Л.Ю., 237  
Антонова О.В., 146, 153, 162  
Арапов Ю.Г., 11  
Арапова И.Ю., 124  
Арефин С.В., 186  
Аронзон Б.А., 12  
Архипов В.Е., 128  
Ахматханов А.Р., 88

Бабанов Ю.А., 116  
Бабушкин А.Н., 75, 220  
Балымов К.Г., 49, 50  
Банникова Н.С., 215  
Баранов Н.В., 55, 60  
Бартули Э.Ф., 63  
Батурин И.С., 88, 110  
Бедарев В.А., 78  
Безматерных Л.Н., 78  
Белоненко М.Б., 227  
Белотелова Ю.Н., 143  
Белоусова Е.Ю., 118  
Белых В.В., 161  
Бельский И.Е., 37  
Блинов И.В., 38  
Блинова Ю.В., 143  
Бобров К.С., 64  
Богатищева Н.С., 187  
Богач А.В., 135, 136  
Бондаренко С.И., 138  
Борисевич А.Н., 13  
Бриков Е.С., 57  
Брызгалов А.Н., 147  
Брытков Д.А., 170, 175  
Будовских Е.А., 164  
Бузлуков А.Л., 124, 129

Бузова Е.В., 151  
Буйнова Л.Н., 149  
Бурков А.Т., 100  
Бусов К.А., 188  
Бутусова Е.Н., 144  
Бучкевич А.А., 39  
Бушкова О.В., 119  
Буянова Е.С., 93, 160  
Бызов И.В., 239  
Быструшкин В.Б., 40

Вайнштейн И.А., 118  
Васьковский В.О., 14, 39, 43, 49, 50  
Величко Е.В., 93  
Вербенко И.А., 74  
Верховский С.В., 124, 125, 129  
Вершинин А.В., 145  
Вершинин С.В., 63, 90  
Вешкурова К.А., 51, 65  
Витошнев В.В., 54  
Власова А.М., 146, 162  
Власова Н.И., 167  
Волегов А.С., 41, 51, 52, 60, 65, 66  
Волков А.Ю., 155  
Волков Д.С., 212  
Волков П.В., 147  
Волкова З.Н., 125, 128  
Волкова Н.В., 94  
Волкова Я.Ю., 84  
Волосников Д.В., 189, 196  
Воронов В.Н., 76  
Вохминцев А.С., 118  
Втюрин А.Н., 76

Гавико В.С., 167  
Гаврилюк А.А., 42  
Гажулина А.П., 148  
Галкина Т.А., 126  
Гапонцев В.В., 95  
Герасимов Е.Г., 55  
Герашенко А.П., 124, 125, 129  
Гильдин Е.Ю., 195  
Глушков В.В., 135, 136  
Глушков Д.А., 201  
Гобов Ю.Л., 180  
Гольгин Е.А., 42

- Горьковенко А.Н., 43  
 Гохфельд Н.В., 149  
 Григорьев А.Д., 137  
 Григорьев П.Д., 96, 137  
 Григорьев С.В., 54  
 Гринберг Б.А., 146, 153, 162  
 Громов В.Е., 164  
 Губайдуллин Р.Р., 44  
 Губкин А.Ф., 55  
 Гудина С.В., 98  
 Гуляев Р.В., 117  
 Гундеров Д.В., 167  
 Гусев М.Н., 150
- Давыдов А.Ю., 45  
 Данилов С.Е., 157  
 Данильсон Ю.Н., 66  
 Демидова Д.А., 150  
 Демишев С.В., 135, 136  
 Демко В.П., 58  
 Денисова О.В., 158  
 Дерягина И.Л., 15, 152  
 Добросмыслов С.С., 202  
 Дубинин С.Ф., 22, 159  
 Дубов И.Ю., 44  
 Дьяченко А.А., 40  
 Дюгаев А.М., 137  
 Дядькин В.А., 54  
 Дякин В.В., 18
- Евсюков С.Е., 221  
 Елисеева Н.Ю., 219  
 Елкина О.А., 153  
 Елохина Л.В., 169  
 Елсуков Е.П., 223  
 Елфимова Е.А., 216, 217, 228  
 Еникеев Ю.А., 47  
 Епифанов Ю.А., 213  
 Ермаков А.Е., 239  
 Ермаков Г.В., 81  
 Ефимова В.А., 228  
 Ефремов А.В., 46, 182
- Журавский Д.В., 57
- Забегаев С.О., 67  
 Загрербин Л.Д., 190, 193  
 Зайнулин Ю.Г., 105  
 Зайцев Д.В., 151  
 Закирьянов Ф.К., 238
- Замулин И.С., 214  
 Зарипов Р.Р., 68  
 Захаревская Е.Г., 152  
 Захаров М.С., 48  
 Заяц С.В., 203  
 Зотов И.С., 127  
 Зубарев Н.М., 204–206  
 Зубарева О.В., 204, 205
- Иванов А.А., 103, 104  
 Иванов А.О., 228  
 Иванов В.Е., 56  
 Иванов М.А., 146, 153, 162  
 Иноземцев А.В., 153  
 Истомин А.И., 86
- Кадырова Н.И., 105  
 Казанцева Л.П., 69  
 Кайгородов А.С., 16  
 Калинина Ю.И., 109  
 Каменецкий Б.И., 155  
 Каменский И.Ю., 224  
 Каракулов О.Е., 190  
 Карзанова М.В., 109  
 Карпов Д.А., 110  
 Катанин А.А., 46  
 Кесарев А.Г., 154  
 Киреева И.В., 66, 72  
 Киселёва М.С., 215  
 Кислов Е.А., 208  
 Клепикова А.С., 98  
 Коверя В.П., 138  
 Козин Р.В., 111  
 Колосов В.Ю., 219  
 Комарский А.А., 208  
 Комогорцев С.В., 17  
 Кондратьев В.В., 154  
 Кондратьев Д.В., 112  
 Кормильцев И.В., 179  
 Коробов Ю.А., 70  
 Королёв А.В., 71, 128  
 Кортаев Е.В., 113  
 Коротин Дм.М., 114  
 Коротин М.А., 46  
 Корх М.К., 181, 182  
 Корякова О.В., 221  
 Костромитина Н.В., 169  
 Котков Д.Н., 144  
 Коуров Н.И., 94

- Кочурин Е.А., 206  
Кравченко О.Ю., 191  
Кревсун А.В., 138  
Кретинина И.В., 72  
Криницина Т.П., 143  
Кругликов Н.А., 146, 155, 162  
Крутикова Е.В., 216  
Крылов А.С., 76  
Крылова С.Н., 76  
Кудреватых Н.В., 41, 52  
Кудряшова О.В., 18  
Кузнецов А.С., 217  
Кузнецов В.Л., 208  
Кузнецов Д.К., 115  
Кузнецова Е.И., 143  
Куколев В.И., 114  
Кулеев И.Г., 139  
Кулеев И.И., 139  
Кулеш Н.А., 39, 49, 50  
Курочка К.В., 97  
Кутергина Н.А., 192  
Кэмп Ф., 228
- Лаврухина С.А., 113  
Латышов М.Н., 70  
Лебедев Н.Г., 218, 227, 232  
Левина А.В., 174  
Левченко Н.М., 138  
Лекомцев С.А., 128  
Лепаловский В.Н., 43  
Липнягов Е.В., 81  
Литовченко И.Ю., 163  
Лобов А.И., 115  
Логинов В.Н., 19  
Ломаев И.Л., 154  
Лукоянов А.В., 40  
Ляпкосова О.С., 218  
Ляпунова Е.А., 156  
Ляшков К.А., 157
- Мажейко Н.А., 188  
Майданик Ю.Ф., 21, 63, 90  
Маканов С.В., 158  
Максимкин О.П., 150  
Максимкин О.П., 165  
Максимов В.И., 22, 159  
Мальшева А.В., 219  
Мальцева Е.Г., 220  
Мальцева Л.А., 174
- Маркин П.Е., 41  
Марченков В.В., 94  
Марычев М.О., 148  
Маюра Н.С., 50  
Медведева М.А., 73  
Мельникова Н.В., 97, 100, 105  
Мензель Д., 54  
Мережко М.С., 165  
Меренцов А.И., 51, 65  
Мигранов Н.Г., 112  
Миллер А.И., 74  
Миляев М.А., 38, 215, 224  
Мингалиев Е.А., 115  
Мирзагаляммов Р.Р., 75  
Мирзоев А.А., 166, 171  
Миронов Г.И., 212, 229  
Михайлов А.В., 180  
Михайловская З.А., 160  
Михалёв К.Н., 23, 125, 128, 129  
Михеев А.В., 113  
Мокшин А.В., 67  
Моллаев А.Ю., 75  
Морилова В.М., 221  
Морозова М.В., 93  
Мостовщикова Е.В., 24  
Муковский Я.М., 128  
Мухаметшина И.Ю., 161, 193  
Мушников Н.В., 25  
Мысик А.А., 239
- Нагаев Ф.А., 194  
Наймарк О.Б., 156  
Наумов С.В., 169  
Наумова Л.И., 215, 224  
Неверов В.В., 103, 104  
Неверов В.Н., 98  
Негашев С.А., 115  
Незнахин Д.С., 41, 52  
Некрасов И.А., 102  
Неустроев А.С., 99  
Никифоров А.Е., 111, 123  
Новиков С.В., 100  
Нохрин А.В., 144
- Овчинников С.Г., 237  
Оглобличев В.В., 124, 129, 130  
Огнева М.С., 181  
Озерец Н.Н., 174  
Омаров З.М., 191



- Орешонков А.С., 76  
Орлов И.О., 26  
Орлов Л.К., 101  
Орлов М.Л., 101  
Орлова Н.Б., 27
- Павелко А.А., 77  
Павленко А.В., 77  
Павлов Н.С., 102  
Павлухина О.О., 53  
Памятных Л.А., 37  
Панов Ю.Д., 45  
Панфилов П.Е., 151  
Пархоменко В.Д., 159  
Пацелов А.М., 153  
Пащенко М.И., 78  
Песин Л.А., 221  
Петров А.Л., 42  
Петров С.В., 47  
Петров С.И., 195, 198  
Петрова С.А., 93, 160  
Петухов Д.С., 103, 104  
Петухова О.Е., 103, 104  
Пилюгин В.П., 168, 170, 175  
Пинигина К.С., 79  
Пискунов Ю.В., 28, 124, 129  
Пиядов В.В., 54  
Плотников А.В., 146, 162  
Пляшкевич В.А., 117  
Подгорных С.М., 29  
Попов А.Г., 167  
Попов В.В., 38, 168  
Попов З.И., 222  
Попов С.Э., 119  
Попова Е.Н., 15, 152, 168  
Попова С.А., 163  
Поспелов Е.А., 80  
Потеряев А.И., 46  
Проглядо В.В., 215, 224  
Протасов А.В., 223  
Прошкин А.В., 55  
Прудников П.В., 73, 80  
Пушин В.Г., 149
- Раков Д.Н., 143  
Резинкина О.А., 202  
Ремпель А.А., 30  
Реутова А.Г., 207  
Решетников А.В., 188
- Романов Д.А., 164  
Романов Е.П., 15  
Рубан С.В., 150, 165  
Рузанова Г.Е., 166  
Румянцев Е.Л., 115  
Рыбин В.В., 153  
Рыбин С.В., 165  
Рябова Т.А., 224
- Сабириянова Э.А., 41, 56  
Савадж К., 167  
Саврай Р.В., 155  
Садовский М.В., 31  
Садыков А.Ф., 124, 129  
Саламатов Ю.А., 116  
Самарин Н.А., 135, 136  
Свитова К.В., 81  
Семеняк Д.Н., 225  
Семёнова М.И., 99  
Семущкина Г.И., 113, 117  
Сергеева В.В., 19  
Скоков В.Н., 32  
Скоморохов Д.С., 208  
Скорняков С.Л., 46  
Слепухин Г.С., 111  
Случанко Н.Е., 135, 136  
Смирнов И.А., 57  
Смольников А.Г., 130  
Сморodinский Я.Г., 180  
Смотрицкий А.А., 189, 196  
Соковиков М.А., 156  
Соловьёва Ю.В., 146, 162  
Спиридонов Д.М., 118  
Стариченко Д.В., 225  
Старостин А.А., 189  
Сташков А.Н., 182  
Сташкова Л.А., 167  
Степанова Е.А., 60  
Столбовский А.В., 168  
Стороженко А.М., 226  
Сударева С.В., 143  
Судоргин С.А., 227  
Суркова Т.П., 159  
Суханов И.В., 82  
Суханова Г.В., 82
- Таланов М.В., 74  
Тебеньков А.В., 75, 84, 87  
Телегин А.В., 33

- Телегин С.В., 169  
Темеров В.Л., 78  
Терентьева В.А., 208  
Тетерин А.С., 83, 197  
Тимофеева Е.Е., 69  
Типеев А.О., 197  
Тихомирова Г.В., 84  
Толмачев Т.П., 175  
Толмачёв Т.П., 170  
Томилин Ф.Н., 237  
Турутина Е.А., 85  
Турышева Е.В., 228  
Тюменцева Н.В., 239
- Уваров С.В., 156  
Удовиченко Е.В., 58  
Уймин М.А., 239  
Ульянов А.Л., 193  
Урсаева А.В., 171  
Устинова И.С., 105
- Фатыхов М.А., 194  
Федоренко А.Д., 113  
Фёдоров А.С., 222  
Фёдоров С.И., 172  
Фёдорова Н.С., 59  
Филипов В.Б., 135, 136  
Филиппов А.Л., 79, 86, 87  
Филиппов Д.А., 126  
Филиппова Е.Р., 229  
Фокин А.В., 131
- Хамзин С.Р., 238  
Харус Г.И., 103, 104  
Хейфец О.Л., 79, 85, 87  
Хотиенкова М.Н., 185, 198  
Хрипунов Ю.В., 173  
Хуснутдинов Р.М., 68
- Циовкин Ю.Ю., 40, 95
- Чарикова Т.Б., 103, 104  
Чезганов Д.С., 88  
Чепкасов И.В., 230  
Чепусов А.С., 208  
Черноусов А.А., 202  
Черных И.В., 201  
Чернышев В.А., 111  
Чигиринский Ю.И., 109  
Чиркова А.М., 60
- Чувильдеев В.Н., 144  
Чудинов В.В., 156  
Чукин А.В., 158  
Чумляков Ю.И., 72
- Шабанова И.А., 231  
Шакиров Э.Ф., 87, 89  
Шамина Е.Н., 232  
Шарапова В.А., 174, 239  
Шахова И.В., 233  
Швачко Ю.Н., 225  
Шелушинина Н.Г., 103, 104  
Шицевалова Н.Ю., 135, 136  
Шматов Г.А., 37  
Шориков А.О., 40, 46  
Шпак В.Г., 207  
Шунайлов С.А., 207  
Шур В.Я., 88, 110, 115
- Щёголева Н.Н., 43
- Эккерлебе Х., 54  
Эркабаев А.М., 119
- Юшакова С.И., 90  
Юшков Б.Г., 239
- Яландин М.И., 207  
Ярославцев А.А., 175  
Ярычева З.Л., 42

XI Всероссийская молодёжная школа-семинар  
по проблемам физики конденсированного состояния вещества

**СПФКС-11**

*15-21 ноября 2010 г.*

**Тезисы докладов**

Ответственный за выпуск — П.А. Агзамова.  
Компьютерная вёрстка — П.А. Агзамова, Н.Н. Гапонцева

**Орфография, а также оформление рисунков соответствуют качеству предоставленных оригиналов.**

Подписано в печать 01.11.2010. Формат 70×108/16.  
Тираж 230 экз. Усл. печ. л. 21.3 Заказ 226

Институт физики металлов УрО РАН  
620041, г. Екатеринбург, ГСП-170, ул. С.Ковалевской, 18

Отпечатано с готового оригинал-макета.  
Типография «Уральский центр академического обслуживания»  
620219, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, 91