



Сборник тезисов
XXIII Всероссийской конференции

Проблемы физики
твёрдого тела
и высоких давлений

Сочи, пансионат «Буревестник»

20 – 29 сентября 2024 г.

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

**XXIII Всероссийская конференция
«Проблемы физики твердого тела
и высоких давлений»**

г. Сочи, пансионат «Буревестник»
20 – 29 сентября 2024 г.

ТЕЗИСЫ

Москва, ФИАН 2024

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

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

Редакционная коллегия: В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН); В. Н. Рыжов д.ф.-м.н. (ИФВД РАН); А. А. Федягин, д.ф.-м.н., проректор (МГУ им. М. В. Ломоносова); В. Е. Антонов, д.ф.-м.н. (ИФТТ РАН); М. М. Глазов, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН); С. В. Демишин, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН); Е. Н. Циок, к.ф.-м.н. (ИФВД РАН); обложка: З. Н. Волкова, к.ф.-м.н. (ИФМ УрО РАН).

К26 Проблемы физики твердого тела и высоких давлений:
Тезисы XXIII Всероссийской конференции, г. Сочи,
пансионат «Буревестник», 20–29 сентября 2024 г. –
Москва–Сочи: Изд-во ФИАН, 2024. – 169 с.

Problems of solid-state physics and high-pressure science:
Abstracts of the XXIII All-Russian Conference, Sochi,
“Burevestnik” pension, September, 20–29, 2024. – Moscow–
Sochi: LPI RAS Publ., 2024. – 169 p.

ISBN 978-5-902622-47-5

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

ISBN 978-5-902622-47-5

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

© Коллектив авторов, 2024
© ФИАН, 2024

От редакции

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

С течением времени увеличивалось количество молодых участников, интерес к участию в Конференции проявлял все более широкий круг ученых. В 2014 году Оргкомитет Конференции принял решение с 2015 года проводить данную конференцию ежегодно, организуя ее по очереди силами Института физики высоких давлений РАН, Физического института РАН и Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, для того, чтобы охватить больший круг молодых ученых. Таким образом, проводимая ИФВД РАН в 2024 году Конференция будет 23-й в общем ряду конференций «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» и будет носить Всероссийский характер.

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

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

<http://hppi.troitsk.ru/meetings/school/XXIII-2024/inform-24.htm>

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

ОРГАНИЗАТОРЫ

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

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

Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

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

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

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

СОДЕРЖАНИЕ

От редакции.....	3
ОРГАНИЗАТОРЫ	4
СОДЕРЖАНИЕ.....	5

МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ ГЕКСАБОРИДОВ RB₆ (R-Pr, Nd, Gd) С ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ СТРУКТУРНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ

Азаревич А. Н., Богач А. В., Хрыкина О. Н., Болотина Н. Б., Гридчина В. М., Шицевалова Н. Ю., Гаврилкин С. Ю., Цветков А. Ю., Габани С., Флахбарт К., Случанко Н. Е...... 17

УПРУГИЕ СВОЙСТВА, ПИРОЛИЗ И ДИФФУЗИЯ ГАЗА В КЕРОГЕНАХ ПО ДАННЫМ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Алексеева М.С., Логунов М.А., Ананьев А.А., Хлюпин А.Н., Кондратюк Н.Д...... 19

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДИСПРОЗИИ – АНОМАЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В ПЕРЕМЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Алиев А. М. 21

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПРОПИТКИ ГРАФИТА СВИНЦОМ НА ПРОЧНОСТЬ КОМПОЗИТА НА СЖАТИЕ

Антанович А.А. 23

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ ОХЛАЖДЕНИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ В МЕЗОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТЕКЛОВАНИЯ

Анкудинов В. Е., Васин М. Г., Шкляев К. Я. 25

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ АМОРФНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ В СИСТЕМЕ БОР-УГЛЕРОД

Баграмов Р. Х. 26

ВЯЗКОСТЬ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ РАСПЛАВОВ AL-ZN <u>Баталова Е. А., Камаева Л. В. , Файзуллина С. В.</u>	28
ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГИИ СПИН-ОРБИТАЛЬНОЙ СВЯЗИ НА МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУР NiFe/Cu/IrMn И NiFe/Ta/IrMn <u>Бахметьев М.В., Моргунов Р.Б.</u>	30
МОДЕЛЬ ДИКЕ В РЕЖИМЕ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ С ДИССИПАЦИЕЙ <u>Бек М.Э.С., Сеидов С.С., Мухин С. И.</u>	31
СТРУКТУРА НЕАФФИННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ В АМОРФНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ <u>Конюх Д. А., Бабин Д. В., Бельтиков Я. М.</u>	33
ИЗУЧЕНИЕ МАГНИТНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ВЫЗВАННЫХ ИЗМЕНЕНИЕМ СРЕДНЕЙ ВАЛЕНТНОСТИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНОВ В РЯДУ $Tb_{1-x}Yb_xNiC_2$ <u>Боков А. В., Сидоров В. А., Богач А. В., Саламатин Д. А., Краснорусский В.Н., Зибров И. П., Цвященко А. В.</u>	35
УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ С МАЛЫМ ЧИСЛОМ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ ЖИДКОЙ ФАЗЫ МЕДИ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ <u>Боярских К. А., Хищенко К. В.</u>	37
«СТРЕЛА ВРЕМЕНИ» В МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ВСЕЛЕННОЙ <u>Бражкин В.В.</u>	38
ЭНТРОПИЯ ФУНКЦИИ ВИГНЕРА ДЛЯ СЛУЧАЯ АБСОЛЮТНО УПРУГОГО СТОЛКНОВЕНИЯ ДВУХ ЧАСТИЦ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ <u>Бурков И. Д., Сеидов С. С.</u>	38
КРИТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА СПИН-БОЗОННОЙ МОДЕЛИ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ МАЙОРАНОВСКИХ ФЕРМИОНОВ <u>Васин М. Г., Ремизов С. В., Елистратов А. А.</u>	39

РОЛЬ Mn В СТАБИЛИЗАЦИИ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ $\text{LaFe}_{11.2-x}\text{Mn}_x\text{Co}_{0.7}\text{Si}_{1.1}$ В ПЕРЕМЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Гамзатов А.Г., Н.З. Абдулкадирова, А.М. Алиев,..... 40

ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ ГЕЛИКОИДАЛЬНЫХ И ХОЛДЕЙНОВСКИХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

Гиппиус А. А...... 42

НОВЫЙ МЕХАНИЗМ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В СЛОИСТЫХ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛУМЕТАЛЛАХ

П.Д. Григорьев, И.Р. Шеин, А.В. Садаков, О.А. Соболевский, Н.С. Павлов, И.А. Некрасов, Е. Мальцев, В. М. Пудалов..... 44

ОГРАНИЧЕННЫЙ И НЕОГРАНИЧЕННЫЙ РОСТ ВОЗМУЩЕНИЙ С РИФЛЁНОЙ СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ УДАРНОМ НАГРУЖЕНИИ МЕТАЛЛОВ

Григорьев С. Ю., Дьячков С. А., Паршиков А. Н., Жаховский В. В. 46

СВЕРДЛОВСК И СТАНОВЛЕНИЕ АТОМНОГО ПРОЕКТА СССР
С.А.Гудин

МЕХАНИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СЛОИСТОГО КРИСТАЛЛА CrSBr

Д. Л. Гусенков, Е. И. Куницына, Р. Б. Моргунов, А. И. Чернов ... 48

ПОВЕРХНОСТНАЯ ЛАЗЕРНАЯ АМОРФИЗАЦИЯ ДВУХФАЗНЫХ МИКРОПРОВОДОВ PrDyFeCoB

Дворецкая Е.В., Моргунов Р.Б...... 49

СПИНОВЫЕ КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ДЕЙСТВИЕ ВЕССА-ЗУМИНО В ЗАДАЧАХ МАГНЕТИЗМА И КВАНТОВОЙ ОПТИКИ

А.А. Елистратов, С.В. Ремизов, М.Г. Васин..... 50

ТЕРМИЧЕСКИ УСТОЙЧИВЫЙ РАСТВОР МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА В СИЛИКАТЕ МАГНИЯ

Ефимченко В. С., Мелетов К. П., Короткова М. А., Сухинина Н.С. 52

ФОРМИРОВАНИЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОЛОСТИ В КРИСТАЛЛЕ LiF РЕНТГЕНОВСКИМ ИМУЛЬСОМ	
<u>Жаховский В. В., Григорьев С. А., Перов Е. А.</u>	54
ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТИ НА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В $R_{0,02}Sm_{0,98}B_6$ (R - Eu, Gd, Yb)	
<u>В. С. Журкин, А. Д. Божко, М. А. Анисимов, А. В. Богач, Н. Ю. Шицевалова, В. В. Глушков</u>	56
К ВОПРОСУ О ПРЕДЕЛАХ ЛЕГИРОВАНИЯ АЛМАЗА И АЛМАЗОПОДОБНОГО НИТРИДА БОРА	
<u>Зибров И. П., Филоненко В. П., Баграмов Р. Х., Ляпин С. Г., Энкович П. В.</u>	58
МАГНИТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И АНИЗОТРОПИЯ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ $MnBi_2Te_4$	
<u>Вальков В. В., Злотников А. О.</u>	60
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АНСАМБЛЯ ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ КОНТАКТОВ, СОДЕРЖАЩИХ МАЙОРАНОВСКИЕ ФЕРМИОНЫ, С ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНОЙ В ОДНОМОДОВОМ РЕЗОНАТОРЕ	
<u>Казак А. И., Сеидов С. С.</u>	62
КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ СПЛАВОВ AL-CU-NI ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ	
<u>Камаева Л. В., Циок Е. Н., Щелкачев Н. М., Бражкин В. В.</u>	64
АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА И ДИФФУЗИИ В ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ 5СВ	
<u>Касапенко Н. А., Кондратюк Н. Д.</u>	66
КВАНТОВАЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ НА ОСНОВЕ ГЕЛИКОИДАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ	
<u>Качоровский В. Ю.</u>	68

АДИАБАТИЧЕСКИЕ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ МИКРОПРОВОДАХ Gd	И ЭФФЕКТЫ	ИЗОТЕРМИЧЕСКИЕ В ПЛЕНКАХ И
<u>Кашин С. Н., Моргунов Р. Б.</u>		70
СРАВНЕНИЕ СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЖИДКИХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ЭФИРОВ		
Кашурин О. В.		71
ИЗОТЕРМИЧЕСКОЕ ИЗМЕРЕНИЕ МАГНИТНОЙ ЧАСТИ ЭНТРОПИИ ДВУХФАЗНЫХ МИКРОПРОВОДОВ PrDyFeCoB		
Дворецкая Е.В., Колмаков А.О., Моргунов Р.Б.		73
ПУСТЫЕ НЕ ЗНАЧИТ БЕСПОЛЕЗНЫЕ: ЗАЧЕМ НУЖНЫ S-СОСТОЯНИЯ РТУТИ ПРИ ОПИСАНИИ МАГНЕТИЗМА В HgMnO ₃		
Комлева Е. В., Мякотников Д. А., Стрельцов С. В.		75
ОБРАЗОВАНИЕ NV ДЕФЕКТОВ В НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ НРНТ АЛМАЗАХ		
Коновалова А. В., Паршутич С. Ф.	Игнатенко О. В.,	Ткаченко В. В.,
		75
РЕЛАКСАЦИОННАЯ ДИНАМИКА ТВЕРДОГО РАСТВОРА МАГНОНИОБАТА-СКАНДОНИОБАТА СВИНЦА		
Королева Е. Ю., Вахрушев С. Б.	Молоков А. Ю.,	Вакуленко А. Ф.,
		77
ОДИНОЧНЫЕ НАНОАЛМАЗЫ В МАССИВНОМ КВАРЦЕВОМ СТЕКЛЕ		
Короткова М.А., Ефимченко В.С., Терещенко А.Н., Ходос И.И...		79
МЯГКАЯ МАТЕРИЯ-НА-ЧИПЕ		
Корсакова С. А., Кушнир И. А., Быстров Д. А., Грицаева А. В., Копылова А. А. и Юрченко С. О.		81

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИ-ДВУМЕРНЫХ КОЛЛОИДАХ С РЕГУЛИРУЕМЫМ МЕЖЧАСТИЧНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ	
<u>Кохановская А.В., Денисенко И.Р., Насыров А.Д., Шишков И.Н., Крючков Н.П., Яковлев Е.В.</u>	83
ВЛИЯНИЕ КОНТАКТА С ПОВЕРХНОСТЬЮ ФЕРРОМАГНИТНОГО МЕТАЛЛА НА МАГНИТНУЮ РЕЛАКСАЦИЮ В МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНИТАХ ПРИ ИХ ПРЕССОВАНИИ	
<u>Куницына Е.И., Моргунов Р.Б.</u>	85
НЕЛОКАЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС ИНФОРМАЦИИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ	
<u>Ланкин А. В.</u>	86
ПАРАМАГНОНЫ И РЕЗОНАНСНЫЕ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ ВТСП КУПРАТОВ	
<u>Ларионов И. А.</u>	88
ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ-РЕЛЕВАНТНАЯ ГИДРОДИНАМИКА В МИКРОФЛЮИДНЫХ ЧИПАХ	
<u>Либет П.А., Полынкин Л.Ю., Саридис М.Р., Яковлев Е.В., Корсакова С.А., Салмина А.Б., Аверчук А.С., Розанова Н.А., Юрченко С.О.</u>	89
МЕТОДЫ РАСЧЁТА ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ	
<u>Лобашев Е.А., Фоминых Н.А., Антропов А.С., Стегайлов В.В.</u>	91
МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ ФЛЮИДА ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ	
<u>В.Г. Лукьянчук, Г. А. Гляудялис, И. М. Сайтов, Н. М. Щелкачев, Н. Д. Кондратюк</u>	92

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ КАК ПРИЧИНА ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ-ПОЛУПРОВОДНИК И СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА В ЭЛЕКТРИДЕ Ba_2N ПОД ДАВЛЕНИЕМ		
<u>Мазанникова М. А.,</u>	Коротин Д. М.,	Анисимов В. И.,
Новоселов Д. Ю.....	93	
МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЭКСИТОНОВ В ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ В РЕАЛЬНОМ ВРЕМЕНИ		
Малахов М.А.	95	
РАСЧЕТ ИНТЕГРАЛОВ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НИКЕЛЯ		
Мамонова М. В., Макеев М. Ю.	96	
РЕЗОНАНСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ И НАНОСТУКТУР		
Михалев К.Н.	98	
3D–2D КРОССОВЕР И ФАЗОВЫЙ СДВИГ БИЕНИЙ КВАНТОВЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ МЕТАЛЛАХ		
Могилюк Т. И., Григорьев П. Д.....	100	
УДАРНЫЕ ВОЛНЫ В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ: SPH МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПОДВИЖНОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ		
Мурзов С. А., Рублев Г. Д., Жаховский В. В., Паршиков А. Н. ..	101	
ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ В АКТИВНЫХ СИСТЕМАХ С ПРИТЯЖЕНИЕМ		
Насыров А.Д., Юрченко С.О., Крючков Н.П.	102	
МОДЕЛИРОВАНИЕ СЖАТИЯ ПОЛОСТИ С ГАЗОМ СОПРЯЖЕННЫМ МЕТОДОМ ГИДРОДИНАМИКИ СГЛАЖЕННЫХ ЧАСТИЦ И КОНЕЧНОГО ОБЪЕМА		
А.Н. Нимаков, С.А. Дьячков	103	
БУДУЩЕЕ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИИ		
Ланкин А.В., Норман Г.Э.	105	

УПРАВЛЕНИЕ СХЕМНОЙ ВЯЗКОСТЬЮ В МЕТОДЕ SPH ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ СДВИГОВЫХ ТЕЧЕНИЙ СЖИМАЕМОЙ СРЕДЫ	
Паршиков А.Н.....	107
ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННЫЕ ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ТОПОЛОГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ Bi_2Se_3 И WTe_2	
Перевалова А. Н., Фоминых Б. М., Наумов С. В., Лукоянов А. В., Байдак С. Т., Марченкова Е. Б., Марченков В. В.	108
ФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ СВЕТА НА ПРИМЕРЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО УСИЛИТЕЛЯ БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ	
Ремизов С. В., Елистратов А. А.	109
ЭКРАНИРОВКА УДАРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ПЕСЧАНЫМИ ЭКРАНАМИ	
Рублев Г. Д., Паршиков А.Н.....	111
ГРАФОВЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ КАК НОВАЯ ПАРАДИГМА СОЗДАНИЯ МАШИННО-ОБУЧАЕМЫХ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ	
Рыльцев Р. Е., Щелкачев Н. М.....	111
МЕТОД МОНТЕ КАРЛО ДЛЯ МОДЕЛИ ТРИПЛЕТНЫХ БОЗОНОВ В НИКЕЛАТАХ	
Рюмин В. С., Нужин С. В., Панов Ю. Д., Москвин А. С.	113
АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ДЖОЗЕФСОНА В ПЛАНАРНОЙ СТРУКТУРЕ СВЕРХПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНЕТИК СО СПИН-ОРИБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ	
Самохвалов А.В.	114
ТРАЕКТОРИИ ВИГНЕРА ДЛЯ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ С НЕПРОНИЦАЕМЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ	
Сейдов С. С.	116
НОВЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ РАСЧЕТА КОНТАКТНОГО УГЛА БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ В НАНОПОРАХ	
А. А. Семенчук, И. В. Копаничук, Н. Д. Кондратюк	118

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Co_2MnAl И Mn_2CoAl	
<u>Семянникова А. А., Лукоянов А. В., Ирхин В. Ю., Шредер Е. И., Чернов Е. Д., Перевозчикова Ю. А., Марченкова Е. Б., Марченков В. В.</u>	120
УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ СПЛАВА ЖЕЛЕЗА С ВАНАДИЕМ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ В УДАРНЫХ ВОЛНАХ	
<u>Середкин Н. Н., Хищенко К. В.</u>	121
МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЦИФРОВЫХ ДВОЙНИКОВ МЯГКОЙ МАТЕРИИ	
<u>Симкин И. В., Яковлев Е.В., Широкова А.А., Швецов А.И., Насыров А.Д., Денисенко И.Р., Шишков И.Н., Юрченко С.О., Крючков Н.П.</u>	122
ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ, МАГНИТНЫЕ И СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ЖЕЛЕЗА И ЕГО СОЕДИНЕНИЙ	
<u>Скорняков С. Л., Белозеров А. С., Катанин А. А., Анисимов В. И.</u>	124
ЛОКАЛИЗОВАННАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И ФЕРРОМАГНИТНЫЕ НАНОДОМЕНЫ В ГЕКСАБОРИДАХ RB_6 (R- La, Ce) С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ	
<u>Случанко Н. Е., Азаревич А. Н., Богач А. В., Демишев С. В., Хрыкина О. Н., Болотина Н. Б., Гридчина В. М., Шицевалова Н. Ю., Гаврилкин С. Ю., Цветков А. Ю., Кузнецов А. В., Габани С., Флахбарт К.</u>	126
ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИЕ ДАТЧИКИ РАЗЛИЧНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН	
<u>Сокольчик Д. П., Нурмухаметов Д. И., Пономарёв Р. С.</u>	128
ПРОИСХОЖДЕНИЕ КАЛИБРОВОЧНЫХ КОНСТРУКЦИЙ В ТЕОРИИ СТЕКЛА	
<u>Сон Л.Д.</u>	130

ПЕРВОПРИНЦИПНАЯ МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ДИССОЦИАЦИИ ЭКСИТОНА, КАК КЛЮЧЕВОЙ МЕХАНИЗМ ПЛАЗМЕННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ПЛОТНОМ ФЛЮДЕ ВОДОРОДА И АЗОТА	
Федоров И. Д., Стегайлов В. В.....	132
НАНОРАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В ОДНОДОМЕННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦАХ ЖЕЛЕЗА	
Суворкова Е. В. , Гермов А. Ю., Михалев К. Н., Уймин М. А., Бекетов И. В., Медведев А. И	133
СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СЛОИСТЫХ АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТАХ ПРИ КРУЧЕНИИ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ	
Сундеев Р. В., Шалимова А. В. , Рогачев С. О. , Глезер А. М., Черногорова О. П. , Ситников Н. Н	135
ВЛИЯНИЕ РАВНОКАНАЛЬНОГО УГЛОВОГО ПРЕССОВАНИЯ И ГИДРОЭКСТРУЗИИ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА АМЦ	
Гангало А.Н., Суровицкий В.Д., Сенникова Л.Ф.....	136
ЭФФЕКТИВНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ КУПЕРОВСКИХ ПАР БЕЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ	
Тихонов Е. С	138
ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ VTE_2O_2	
Трифонов И.О., Анисимов В.И. , Скорняков С.Л.	140
АЛГОРИТМ ТЕРМОСТАТА ДЛЯ МОДЕЛИРОНИЯ СИСТЕМЫ ЛОКАЛЬНЫХ БОЗОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО	
Улитко В. А., Пятков А. Ю., Панов Ю. Д.....	141
ДИНАМИКА РЕШЕТКИ ГИДРИДОВ КОБАЛЬТА	
Усманов Р. И., Кулаков В. И	143
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СТАБИЛЬНОСТИ В-С и В-Н КЛАСТЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ DFT РАСЧЕТОВ	
Федяева М. А., Лепешкин С. В. , Оганов А. Р.....	145

НАНО И МИКРОКРИСТАЛЛЫ НИТРИДА БОРА: СИНТЕЗ, ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И СВОЙСТВА Филоненко В. П., Шипков А. Н., Зибров И. П., Баграмов Р. Х., Ляпин С. Г., Энкович П. В.	146
МАГНИТОТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА Bi_2Se_3 , ОБЛУЧЕННЫХ ИОНАМИ АРГОНА Фоминых Б.М., Перевалова А.Н., Степанов А.Е., Наумов С.В., Шаломов К.В., Гущина Н.В., Марченков В.В.	149
ТРИМЕРОННОЕ, УПОРЯДОЧЕНИЕ МАГНЕТИТА Фоминых Н.А., Стегайлов В.В.	151
ПРОБЛЕМА УЧЕТА СПИНОВЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ В МАШИННО-ОБУЧАЕМЫХ МЕЖЧАСТИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛАХ: ПРИМЕР СИСТЕМЫ Fe-Cr-C Е.О. Хазиева, Н.М. Щелкачев, Р.Е. Рыльцев	152
МОДЕЛИ ТЕРМОДИНАМИКИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ДЕЙСТВИИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ Хищенко К. В.	154
ЭЛЕКТРОННАЯ ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В СОЕДИНЕНИИ С ВОЛНОЙ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ И НЕИДЕАЛЬНЫМ НЕСТИНГОМ Цветкова А. В., Родионов Я. И., Григорьев П. Д.	155
ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА MnTe Чернов Е. Д., Лукоянов А. В.	156
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРНАРНЫХ ОКСИДОВ СИСТЕМЫ U-МО-О ПРИ ПОМОЩИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДОВ И DFT-РАСЧЕТОВ Чичеватов Г.Д., Артоболевский С.В., Подрезова Л.Н.	157

ИССЛЕДОВАНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В Fe_3O_4 И $FeCr_2O_4$ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА DFT+U В КОНТЕКСТЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Чичеватов Г. Д., Стегайлов В. В...... **159**

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АЛМАЗОВ, ВЫРАЩЕННЫХ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НИКЕЛЯ

Шахов Ф.М., Осипов В.Ю., Попов В.В., Трофимук А.Д. **161**

ПОДХОД МАРКОВСКИХ ЦЕПЕЙ ДЛЯ АНАЛИЗА ФРУСТРИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ ОДНОМЕРНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

Ясинская Д. Н., Панов Ю. Д...... **163**

ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЙ МЕТОД КРАТЧАЙШИХ ГРАФОВ ДЛЯ АНАЛИЗА ПАРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ЖИДКОСТЯХ

Денисенко И.Р., Насыров А.Д. , Юрченко С.О., Крючков Н.П. .. **164**

КОЛЛОИДНЫЕ СИСТЕМЫ ВО ВНЕШНИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ: ВЗГЛЯД В ГЛУБИНУ

Широкова А.А., Швецов А.И., Симкин И.В., Кохановская А.В., Либет П.А., Яковлев Е.В. **166**

РОЛЬ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЗАДАЧАХ НЕФТЕГАЗОВОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Кондратюк Н.Д., Писарев В.В...... **168**

МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ ГЕКСАБОРИДОВ RB₆ (R- Pr, Nd, Gd) С ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ СТРУКТУРНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ

Азаревич А. Н.^{1,*}, Богач А. В.¹, Хрыкина О. Н.^{1,2}, Болотина Н. Б.²,
Гридчина В. М.^{1,2}, Шицевалова Н. Ю.³, Гаврилкин С. Ю.⁴,
Цветков А. Ю.⁴, Габани С.⁵, Флахбарт К.⁵, Случанко Н. Е.¹

¹Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия

²НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия

³Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича,
Киев, Украина

⁴Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

⁵Институт экспериментальной физики САН, Кошице, Словакия

**azarevich@lt.gpi.ru*

Выполненные в работе низкотемпературные измерения удельного сопротивления, намагниченности и теплоемкости позволили восстановить H - T диаграммы и впервые построить H - φ магнитные фазовые диаграммы антиферромагнетиков (АФ) RB_6 (R -Pr, Nd, Gd) с ян-тэллеровской структурной неустойчивостью борного ковалентного каркаса. Согласно [1], коллективная ян-тэллеровская мода в оптических спектрах $Gd_{1-x}La_xB_6$ наблюдается на частотах $400 \div 1000$ cm^{-1} , что обуславливает возникновение при низких температурах динамических зарядовых страйпов вдоль направлений $<100>$ в кубической решетке гексаборидов [2-4]. Поскольку флуктуации электронной плотности в страйпах подавляют непрямой

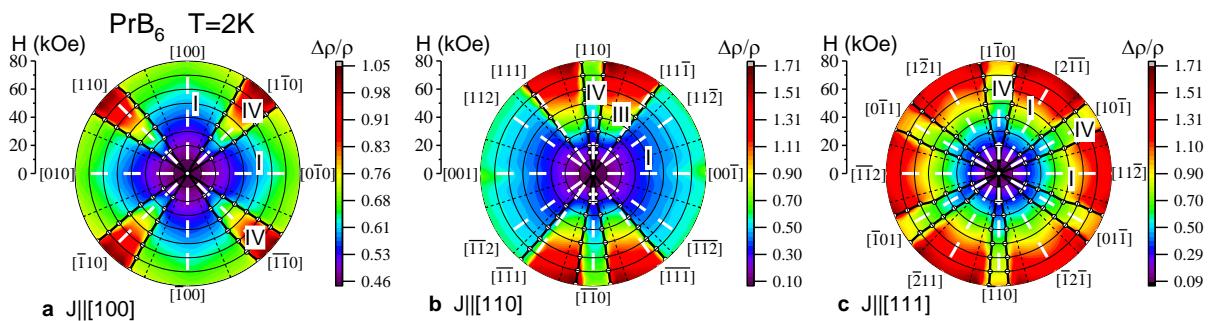


Рис.1. Магнетосопротивление PrB_6 в полярных (H, φ) координатах при вращении образцов вокруг осей $I \parallel [100]$, $[110]$ и $[111]$ (панели а, б и с соответственно) при $T=2\text{K}$.

РККИ обмен через электроны проводимости между соседними магнитными R-ионами, расположенными в направлениях $<100>$ кубической решетки, представляет интерес исследовать обусловленные страйпами эффекты понижения симметрии и особенности формирования магнитного основного состояния в АФ металлах RB_6 .

Для примера на рис.1-2 в полярных (H, φ) координатах показаны полученные в работе угловые магнитные фазовые диаграммы PrB_6 и NdB_6 соответственно, восстановленные по данным измерений поперечного магнетосопротивления при вращении образцов вокруг осей $I \parallel [100]$, $[110]$ и $[111]$ при $T=2$ К. Радиальные фазовые границы показаны черной линией, римские цифры отвечают различным магнитоупорядоченным фазам.

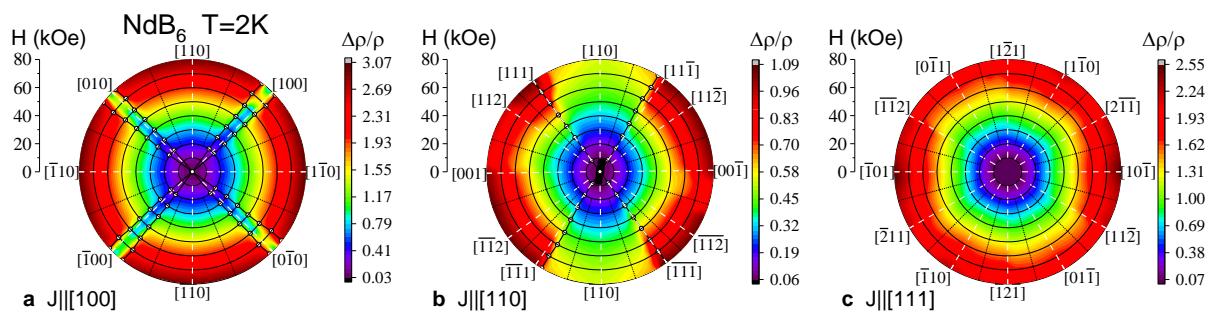


Рис.2. Магнетосопротивление NdB_6 в полярных (H, φ) координатах при вращении образцов вокруг осей $I \parallel [100]$, $[110]$ и $[111]$ (панели а, б и с соответственно) при $T=2$ К.

Совмещение 2D фазовых H - φ диаграмм для каждого из антиферромагнетиков семейства RB_6 позволило построить 3D H - φ - θ магнитные диаграммы и выполнить их сравнительный анализ для соединений ряда.

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

Литература

1. E. S. Zhukova, et al., *Phys. Rev. B*, **100**, 104302, **2019**
2. A. P. Dudka, et al., *Phys. Rev. B*, **100**, 205103, **2019**
3. O. N. Khrykina et al., *J. Alloys and Comp.* **970**, 172527, **2024**
4. А. Н. Азаревич и др., Письма в ЖЭТФ, **119**, 909, **2024**

УПРУГИЕ СВОЙСТВА, ПИРОЛИЗ И ДИФФУЗИЯ ГАЗА В КЕРОГЕНАХ ПО ДАННЫМ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Алексеева М.С.^{1,2}, Логунов М.А.^{1,2}, Ананьев А.А.¹, Хлюпин А.Н.¹,
Кондратюк Н.Д.^{1,2,3}

¹*Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет)*

²*Объединённый институт высоких температур РАН*

³*Национальный исследовательский университет Высшая школа
экономики
alekseeva.ms@phystech.edu*

Кероген – это смесь органических веществ, преимущественно остатков растений и животных, которые в процессе диагенеза и катагенеза подверглись изменениям и уплотнению. Состав керогена меняется в зависимости от возраста и истории Т/Р исходной породы, при этом керогены становятся более богатыми углеродом с увеличением Т, Р и времени. Изучение керогенов [1-5] актуально в свете истощения традиционных углеводородных источников и необходимости поиска новых.

В данной работе проводится атомистическое моделирование керогенов на основе конфигураций, полученных путем случайной упаковки молекул в расчетную ячейку (Рис. 1). Расчеты выполняются для структур с разной упаковкой для выявления общего тренда зависимостей. Исследуется зависимость поведения структуры от скорости сжатия матрицы керогена. Проводятся сравнения результатов, полученных с помощью моделирования в программном пакете GROMACS и LAMMPS с использованием Reax-FF.

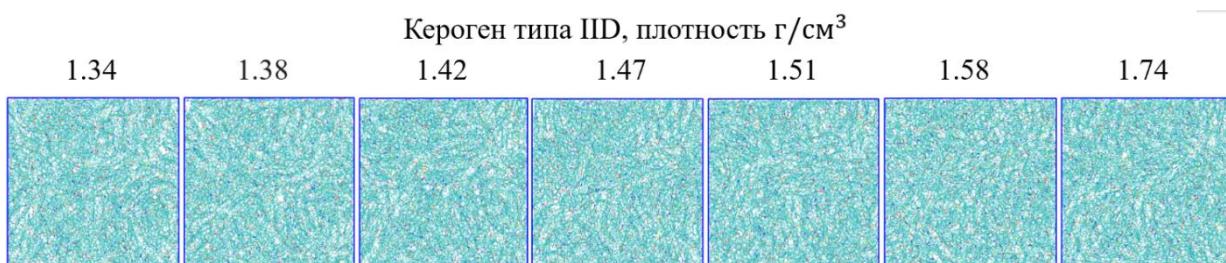


Рис. 1. Различные конфигурации керогена типа IID, для которых проводятся расчеты в данной работе

Исследуются упругие свойства незрелых (IA) и перегретых (IID) керогенов, в частности, объемный модуль упругости и модуль Юнга, а также их зависимость от присутствующего метана в матрице (Рис. 2). Рассматривается взаимосвязь этих параметров с пористостью структуры. В работе определяются продукты пиролиза с помощью молекулярно-динамических расчетов по нагреву керогенов с потенциалом Reax-FF. Результаты сравниваются с экспериментальными данными по продуктам выхода совместно с экспериментальной группой из King Fahd University of Petroleum and Minerals. Проводится анализ траекторий отдельных молекул газа (H_2 , CH_4) в матрице керогена на основе длинных расчетов до 5 мкс.

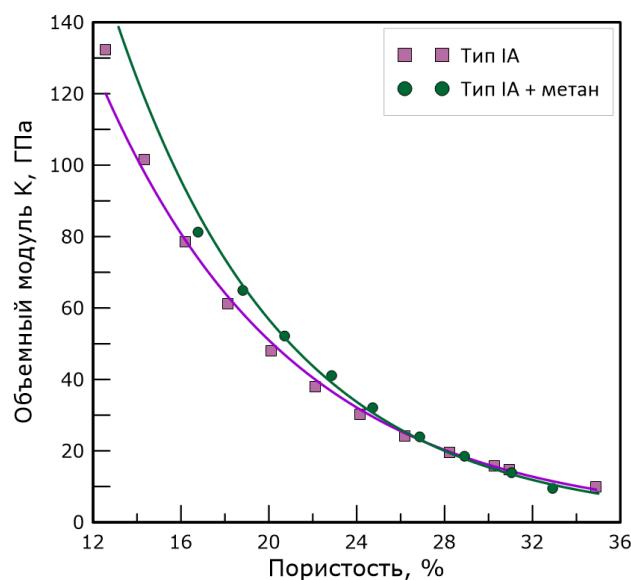


Рис. 2. Зависимость объемного модуля упругости керогена типа IA от наличия метана в матрице

Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075-15-2024-200 от 06.02.2024).

Литература

1. K. B. Yu et al., J. CO₂ Util., **62**, 102105, **2022**
2. A. Kashinath et al., URTeC, SEG, 391, **2019**
3. Y. Qian et al., Int. J. Hydrog. Energy, 41.28, 12093, **2016**
4. H. Lee et al., RSC Adv., 10.39, 23312, **2020**
5. K. B. Yu et al., Energy Fuels, 35.20, 16515, **2021**

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДИСПРОЗИИ – АНОМАЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В ПЕРЕМЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Алиев А. М.

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН

lowtemp@mail.ru

Фазовые переходы в редкоземельных элементах подробно исследованы [1], тем не менее, интерес к исследованию различных особенностей физических свойств этих материалов не ослабевает. Исследование магнитокалорического эффекта является эффективным методом изучения магнитных фазовых переходов, поэтому применяется и для уточнения богатой фазовой диаграммы тяжелых редкоземельных элементов [2]. Особенno эффективным с точки зрения исследования фазовых переходов является измерения МКЭ в слабых магнитных полях. Также существенно уточнить природу магнитных фазовых переходов можно с помощью исследования магнитокалорического эффекта в переменных магнитных полях [3].

В данной работе мы представляем результаты исследования адиабатического изменения температуры ΔT_{ad} в переменных магнитных полях частотой до 30 Гц, при амплитуде изменения поля 0.62 и 1.2 Тл, а также в магнитном поле амплитудой 1.8 Тл и частотой до 0.6 Гц в поликристаллическом образце диспрозия. Поведение ΔT_{ad} в поле 1.8 Тл при малых частотах изменения температуры соответствует литературным данным оценки МКЭ в постоянных магнитных полях или измеренным при разовых циклах приложения магнитного поля [4]. На кривой температурной зависимости ΔT_{ad} наблюдаются два пика, при температурах 171 и 123 К. В переменных магнитных полях большей частоты картина поведения МКЭ существенно меняется. В области фазового перехода парамагнетик-ферромагнетик (около 170 К) наблюдается небольшое уменьшения величины ΔT_{ad} с ростом частоты поля. В области перехода в ферромагнитное состояние уже при частоте 2 Гц кривая $\Delta T_{ad}(T)$ в поле 1.2 Тл смещается в сторону низких температур так, что низкотемпературная часть кривой оказывается за кривой $\Delta T_{ad}(T)$ в поле 1.8 Тл при частоте 0.2 Гц и максимум ΔT_{ad} наблюдается уже при температуре 95 К. С ростом частоты, смещение пика $\Delta T_{ad}(T)$ в сторону низких температур продолжается, достигая температуры 70 К при частоте 30 Гц. С ростом частоты, одновременно со смещением температуры пика МКЭ в

сторону низких температур, наблюдается также рост величины ΔT_{ad} . Такое же смещение температуры максимума $\Delta T_{ad}(T)$ наблюдается в переменных магнитных полях амплитудой 0.62 Тл. При частоте 2 Гц максимум эффекта наблюдается при температуре 85 К, а при частоте 30 Гц – при температуре 70 К. При этом, в отличие от поведения в поле 1.2 Тл, величина ΔT_{ad} существенно уменьшается с ростом частоты поля.

Полученные результаты можно интерпретировать как уменьшение температуры Кюри в переменных магнитных полях. Переменное магнитное поле приводит к нестационарному состоянию, в котором ослабляется магнитное взаимодействие. Для установления точного механизма наблюдаемой картины смещения температуры максимума МКЭ с ростом частоты магнитного поля в диспрозии, требуются дополнительные теоретические и экспериментальные исследования.

С практической точки зрения эти результаты могут представлять интерес как для технологий магнитного охлаждения, так и в других областях. Полученные результаты показывают, что в определенных магнитных системах возможна ситуация, когда посредством повышения частоты магнитного поля можно увеличить величину адиабатического изменения температуры, а также смещать температуру максимума эффекта или изменять температуру магнитного фазового перехода.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 24-12-00362).

Литература

1. К.П. Белов, Р.З. Левитин, С.А. Никитин, Успехи физических наук, **82**, 449, **1964**
2. А.С. Андреенко, К.П. Белов и др. Успехи физических наук, **158**, 553, **1989**
3. А.М. Алиев, А.Г. Гамзатов, З.З. Алисултанов, Phys Rev B, в печати.
4. A.S. Chernyshov, A.O. Tsokol et al., Phys Rev B **71**, 184410, **2005**.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПРОПИТКИ ГРАФИТА СВИНЦОМ НА ПРОЧНОСТЬ КОМПОЗИТА НА СЖАТИЕ

Антанович А.А.

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

Низкие значения прочностных свойств и хрупкость графита существенно снижают эффективность его использования. Для устранения этих недостатков графит пропитывают расплавленными металлами, например, как в нашем случае, свинцом. Так как краевой угол смачивания поверхности графита расплавленным свинцом $\theta = 138^\circ > 90^\circ$, то капиллярное давление $P_k = 2\sigma\cos\theta/r$, где σ – поверхностное натяжение расплавленного свинца, а r – радиус капилляра, является отрицательной величиной, и пропитку нужно проводить под высоким давлением P_e . Очевидно, что эффективность пропитки будет зависеть от ее параметров. Это следует, например, из видоизмененного уравнения Уошборна для глубины пропитки L :

$$L = r \sqrt{\frac{\tau(P_e + P_k)}{8\eta}},$$

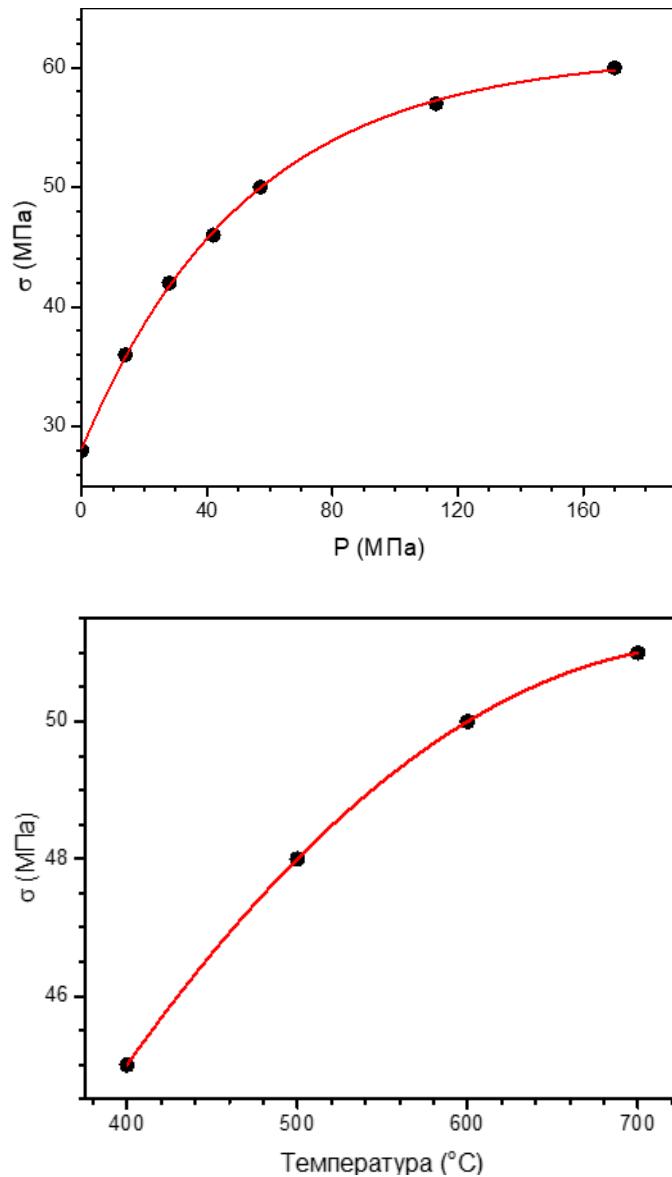
где τ – время пропитки, а η – динамическая вязкость жидкости. Давление входит в это уравнение в явном виде, а температурная зависимость определяется зависимостью динамической вязкости от температуры, которая для свинца [1] приведена в Таблице.

T°C	400	500	600	700	800	900	1000
η , мПа·с	2.23	1.81	1.55	1.36	1.23	1.13	1.05

В настоящей работе экспериментально исследованы зависимости эффективности пропитки графита марки ГЭ свинцом от давления пропитки при постоянной температуре 500°C и от температуры пропитки при постоянном давлении 50 МПа. Для проведения процессов пропитки использовали способ и аппарат высокого давления, о которых докладывали на такой же конференции в 2021 г. [2]. В качестве критерия эффективности пропитки выбрали прочность полученных композитов на сжатие. Для испытаний была подготовлена серия образцов композитов, полученных пропиткой, диаметром 25 мм и высотой 15 мм.

Прочность композита на сжатие определяли как отношение усилия пресса ИП-1000, при котором начиналось разрушение образца композита, к площади торцевой поверхности образца.

На Рисунке приведены графики полученных зависимостей прочности на сжатие образцов композитов от параметров пропитки: сверху от давления, снизу от температуры.



Литература

1. Свойства и процессы рабочих тел и материалов атомной энергетики. Таблица 1.7.2. /Александров А.А., Орлов К.А., Очков В.Ф. – Издательский дом МЭИ, 2012.
2. А.А. Антанович. Тезисы XX Всероссийской школы-конференции «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений». Сочи, пансионат «Буревестник», 2021.

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ ОХЛАЖДЕНИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ В МЕЗОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТЕКЛОВАНИЯ

Анкудинов В. Е., Васин М. Г., Шкляев К. Я.

Институт физики высоких давлений

им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва

vladimir@ankudinov.org

В работе представлена математическая модель, описывающая переход вещества из жидкого состояния в твердое в процессе его охлаждения в условиях теплоотвода. Модель основана на калибровочной теории стеклования [1], записанной в полевой форме [2]. Выполнен численный расчёт системы стохастических дифференциальных уравнений, учитывающих тепловые флуктуации. С помощью предложенной модели описана конкуренция между процессами кристаллизации разных типов и стеклования, протекающими при охлаждении жидкости с разной скоростью. Исследован параметр порядка $(\nabla \times A)$, где A —поле, описывающее упорядочение дальнего порядка (калибровочное поле). Данный параметр порядка характеризует степень нахождения вещества в стекольном состоянии.

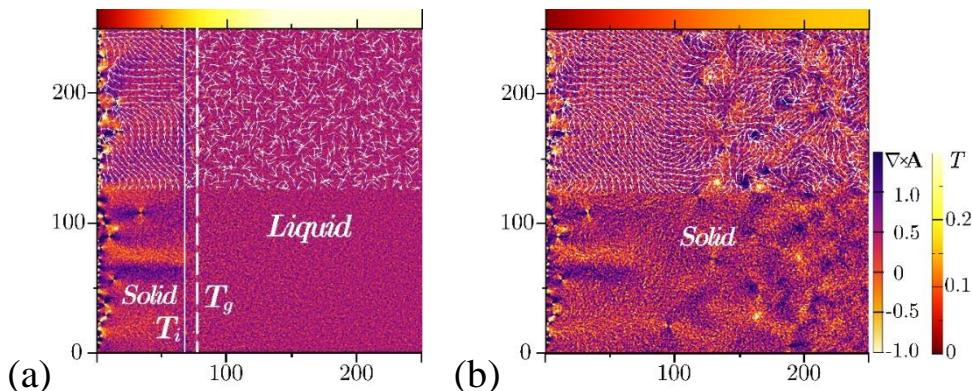


Рис. 1: Эволюция параметра порядка $(\nabla \times A)$ при охлаждении в домене с теплопроводностью $k=3$ (распределение температуры T показано на компактной шкале над доменом, распределение по оси y постоянно):

(a) $t=7000$, (b) $t=15000$. На рисунках (в верхней половине) также представлено векторное поле A , соответствующее распределению напряжений и неоднородностей. На панели (a) приведена изотерма $T_i=0.167$ соответствующая межфазному фронту (сплошная линия), пунктиром обозначена температура перехода T_g .

При скорости фронта ниже некоторой критической величины формируется столбчатый кристаллический агрегат, в объеме которого величина параметра порядка ($\nabla \times A$) мала. При увеличении скорости охлаждения, и соответствующем росте движущих сил, наблюдается переход от столбчатых к равноосным кристаллам (columnar-to-equiaxed transition, CET), качественно схожий с подобным переходом, экспериментально наблюдаемым во многих металлических сплавах. Движущийся фронт следует за равновесной изотермой, соответствующей аналитической температуре перехода T_g , хотя торможение фронта, связанное с конечной скоростью упорядочения поля A приводит к эффекту кинетического переохлаждения на фронте и ограничению предельной скорости фронта кристаллизации. При высокой теплопроводности (что соответствует высокой скорости охлаждения) домен аморфизуется.

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

Литература

1. M.G.Vasin, Phys. Rev. E **106**, 044124 (2022).
2. Vasin M., Ankudinov V. Phase-field model of glass transition: behavior under uniform quenching // Phase Transitions. 2024. P. 1–19.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ АМОРФНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ В СИСТЕМЕ БОР-УГЛЕРОД

Баграмов Р. Х.

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН
bagramov@mail.ru; bagramov@hppi.troitsk.ru

С использованием высоких давлений можно получать различные углеродные материалы: алмазы, высокотвердые фуллериты, композиты и другие с уникальными свойствами. Большой интерес представляют также материалы системы бор-углерод. Бор используют при получении аморфных веществ, поскольку является хорошим "аморфизующим" агентом. Его карбид – третий по твердости после

алмаза и кубического нитрида бора. Бор входит в состав боридов-сверхпроводников. Показано, что в условиях сверхвысоких давлений металлический бор может переходить в сверхпроводящее состояние.

Исследование взаимодействия бора и углерода в условиях высоких давлений в настоящее время особенно актуально. Алмазы, легированные бором, обладают сверхпроводящими свойствами. В настоящей работе показаны некоторые особенности синтеза таких алмазов без использования традиционных металлов-катализаторов. Показано, что бор понижает параметры синтеза относительно параметров прямого перехода графит-алмаз, как в системах, которые содержат водород [1], так и в тех, которые его не содержат [2].

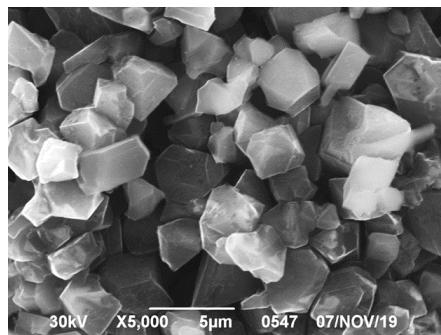


Рис. 1. Борированные алмазы, полученные из борированного графита при 8ГПа и 1600°C.

Установлено, что борированные графиты могут служить сырьем для синтеза борированных алмазов также при пониженных давлениях и температурах. При этом высокие давления перспективны для получения таких графитов с узким распределением по размерами частиц в микронном и субмикронном диапазонах, которые сами являются достаточно востребованными материалами [3].

Кристаллические карбиды бора применяются сегодня как самостоятельные материалы, так и в составе высокотвердых композитов. Аморфные B+C материалы пока не нашли широкого применения. В настоящей работе приводятся результаты исследования взаимодействия аморфного бора и фуллерена C₆₀. Установлено, что при давлениях 2-7,7 ГПа реакция между ними происходит при температурах около 800°C. При этом структура остается аморфной, а получаемый материал обладает высокой упругостью, то есть способностью эластически восстанавливаться после нагружения, например, в экспериментах по индентированию. Это важно для материалов, работающих в условиях переменных нагрузок и

интенсивных деформаций. Варьируя давление и температуру, механические свойства такого материала можно изменять в достаточно широких пределах.

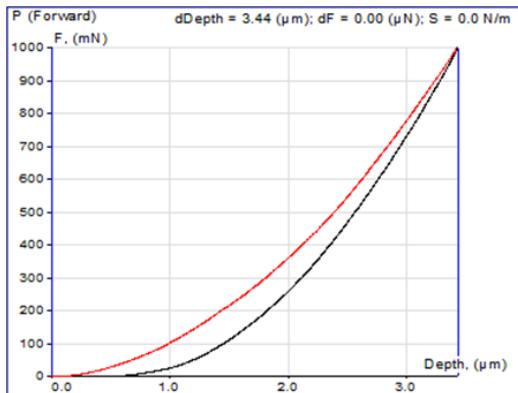


Рис. 2. Кривая нагружение-разгрузка для материала, полученного из смеси аморфного бора и C₆₀ (B/C=1/2 ат.) при 2.0 ГПа и 1000°С, демонстрирующая упругое восстановление около 80 % при индентировании нагрузкой 100 грамм.

Работа выполнена в рамках программы Министерства науки и высшего образования РФ FFUW-2021-0003.

Литература

- 1.E.A. Ekimov, *et al.*, Inorg. Mater., **47**, 1194, **2011**.
- 2.R. Bagramov, *et al.*, Phys. Stat. Solidi (RRL), **14**, 2000247, **2020**
- 3.V.P. Filonenko, *et al.*, Diam. Relat. Mater., **129**, 109383, **2022**.

ВЯЗКОСТЬ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ РАСПЛАВОВ AL-ZN

Баталова Е. А.,¹ Камаева Л. В.¹, Файзуллина С. В.²

¹Удмуртский федеральный исследовательский центр УроРАН,
Ижевск, Россия

²Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия
elizaveta.smagina.97@mail.ru

Сплавы системы Al-Zn обладают большим количеством достоинств, среди которых высокая коррозионная стойкость и отличная литейная способность. В последние годы особое внимание

эти сплавы привлекают в качестве предмета перспективных исследований для разработки нового припоя для сплавов марки АМг, основой которых является система Al-Mg-Mn. Вязкость является одним из основных свойств расплавленного металла, определяющим его литейные свойства, от которых, в свою очередь, зависят структура и свойства получаемых отливок. Так как известно, что припой на основе цинка обеспечивают контактно-реакционную пайку за счет его высокой диффузионной активности, в настоящей работе был проведен анализ температурных и концентрационных зависимостей вязкости расплавов Al-Zn во всей концентрационной области, а также исследованы процессы кристаллизации расплавов выбранной системы в области составов с большим содержанием цинка.

В данной работе методом затухающих крутильных колебаний корундового тигля с расплавом была измерена кинематическая вязкость (ν) расплавов Al-Zn с содержанием цинка от 2,5 до 97,5 ат.%. Эксперименты проводились в атмосфере очищенного гелия на автоматизированной установке.

Подобное исследование процессов переохлаждения и кристаллизации расплавов Al-Zn с большим содержанием цинка (80-97,5 ат.%) при контролируемом медленном охлаждении (до 1 К/с) было проведено на автоматизированной установке также в атмосфере очищенного гелия методом дифференциального термического анализа (ДТА).

Металлографический анализ был проведен на оптическом микроскопе "ZEISS" с системой автоматизированной регистрации и обработки изображения АКСОЛИТ. Для травления шлифов использовался 1%-ый спиртовой раствор HCl.

Установлено, что общая ошибка определения вязкости составляет 9% за счет изменения декремента затухания, вызванного потерей до 15% от массы исследуемого образца при нагреве из-за интенсивного испарения цинка. При такой ошибке на полученных полиграфах вязкости в прямых и координатах ($\ln \nu$, $1/T$) нет ярко – выраженных особенностей, и они хорошо описываются уравнением Аррениуса в исследуемом температурном интервале. Концентрационные зависимости вязкости при охлаждении от четырех различных температур были построены по полученным температурным зависимостям. В результате было обнаружено, что вязкость расплавов Al-Zn уменьшается при увеличении концентрации цинка в расплаве. Причем это уменьшение происходит немонотонно. Наблюдаются три особенности, в которых изотерма вязкости претерпевает существенные

изменения: при 5-7 ат.% Zn, 15-17 ат.% Zn и 87,5-92,5 ат.% Zn. Первая особенность не находит особенных точек на равновесной диаграмме состояния системы, а значит характерна только для жидкого состояния и требует дальнейшего более детального исследования. Вторая – соответствует предельной растворимости Zn в низкотемпературной α -фазе. Третий локальный минимум наблюдается в эвтектической области вблизи 90 ат.% Zn. В концентрационной области с содержанием цинка от 25 до 85 ат.% значения вязкости расплавов в пределах ошибки не зависят от содержания Zn.

Исследования процессов кристаллизации сплавов Al-Zn показывает, что затвердевание расплавов с содержанием цинка от 80 до 97 ат.% начинается в условиях небольших переохлаждений (максимум 30 °C). Установлено, что характер кристаллизации зависит не столько от скорости охлаждения, сколько от температуры расплава. При больших перегревах над температурой ликвидус (T_L) (200-300 °C) характерна неравновесная кристаллизация, в результате которой в сплаве с содержанием цинка 92,5 ат.% наблюдается эвтектическая структура с небольшой долей первичных кристаллов на основе α -Al. В случае, когда перегрев над T_L небольшой (20-30°C), при кристаллизации наблюдается облегченное образование кристаллов цинка. Как следствие, в микроструктуре сплавов с концентрацией цинка меньше эвтектической присутствуют крупные дендриты твердого раствора на основе цинка.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-00370, <https://rscf.ru/project/24-22-00370/>

ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГИИ СПИН-ОРБИТАЛЬНОЙ СВЯЗИ НА МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУР NiFe/Cu/IrMn И NiFe/Ta/IrMn

Бахметьев М.В., Моргунов Р.Б.

ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН
bakhmetiev.maxim@gmail.com

Взаимосвязь магнитных состояний и электрического тока в антиферромагнетиках и явления, вызванные ею, имеют чрезвычайно важное значение в антиферромагнитной спинtronике [1-3]. Эта область претендует на развитие приборов, значительно более

быстродействующих и энергетических по сравнению с приборами ферромагнитной спинtronики.

В работе исследуются структуры NiFe/IrMn с немагнитными слоями Ta и Cu толщиной 0.2 nm, разделяющие интерфейс NiFe/IrMn. Спин-орбитальное взаимодействие в tantalе усиливает обменное взаимодействие между NiFe и IrMn при понижении температуры, делая его выше по сравнению с взаимодействием в образцах с медью той же толщины и выше, чем при использовании структуры NiFe/IrMn. Медь играет роль «обменного изолятора» между NiFe и IrMn, а Ta усиливает спин-орбитальный крутящий момент (Spin-orbit torque) в слое IrMn, что выражается в увеличении поля обменного смещения в 15 раз при температуре 2 K.

Работа выполнена при поддержке программы ФИЦ «Центр проблем химической физики и медицинской химии РАН» 124013100858-3.

Литература

1. V. Baltz et al. Rev. Mod. Phys. **90**, 015005, 2018.
2. R.L. Stamps et al. J. Phys. D: Appl. Phys. **34**, 444, 2001.
3. M. Bakhmetiev et al. Phys. Rev. B **109**, 024433, 2024.

МОДЕЛЬ ДИКЕ В РЕЖИМЕ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ С ДИССИПАЦИЕЙ

Бек М.Э.С.^{1,*}, Сеидов С.С.^{2,1}, Мухин С. И¹.

¹ НИТУ МИСИС, Москва, Россия,

² НИУ ВШЭ, Москва, Россия,

**mes.beck@yandex.ru*

Квантовые вычисления требуют организации взаимодействия большого количества двухуровневых систем (ДУС) между собой, например, посредством связи с электромагнитным полем. Как правило, это достигается помещением ДУС в электромагнитный резонатор с большой добротностью. В квантовых вычислениях взаимодействие между ДУСами обычно слабое, за исключением случаев, когда требуется создать запутанность между ДУСами.

Если допустить взаимодействие между всему ДУС в ансамбле, описание системы возможно с помощью расширенного гамильтониана Дике (РГД)

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

Здесь S_y, S_z являются операторами псевдоспина, q и p являются координатой и импульсом фотонного осциллятора ЭМ- поля, g - константа связи, ω – частота фотонного осциллятора, $2\omega_0$ – разница между уровнями энергии ДУС, ε – параметр, характеризующий прямое взаимодействие ДУС в ансамбле. С помощью данной модели были описаны системы из N ДУСов в circuit QED [1] и в cavity QED [2].

Ранее наша группа исследовала квазиклассическую динамику оптического конденсата [3]. Было показано, что динамика гамильтониана Дике может быть описана динамикой лишь одной переменной, если типичный временный интервал эволюции ДУС намного меньше, чем таковой электромагнитного поля. В этом т.н. состоянии «связанной светимости», ДУС эффективно «следуют» за динамикой ЭМ- поля.

Далее нами была описана динамика РГД в присутствии трения в режиме малой константы связи. В данном случае гамильтониан описывает две почти разделенные системы: псевдоспин и ЭМ- поле. Это разделение позволяет описание трение в РГД с помощью оптического основного уравнения. Тем не менее, в режиме сильной связи между ДУСами и ЭМ- полем, это приближение неприменимо и требуется корректном записать новое основное уравнение для модели Дике.

Для его выведения нужно, во-первых, диагонализовать гамильтониан Дике. По методу, предложенному Мухиным и Гнездиловым [1], был получен диагональный гамильтониан в следующем виде:

$$H = \varepsilon_1 d_1^\dagger d_1 + \varepsilon_2 d_2^\dagger d_2 + \varepsilon.$$

Здесь $d_{1/2}$ – операторы уничтожения одетого состояния, $\varepsilon_{1/2}$ энергии, слабо зависящие от числа возбуждений при больших значениях псевдоспина.

Чтобы описать динамику оптического конденсата с диссипацией, необходимо ввести связь с термостатом гармонических осцилляторов. В гамильтониане, следовательно, возникают дополнительные слагаемые. Гамильтониан термостата: $H_B = \sum_i \omega_i b_i^+ b_i$, где ω_i – частота моды, b_i – оператор уничтожения моды. Взаимодействия термостата и модели Дике обеспечивается слагаемым $\sum_{nm} C_{nm} |n\rangle \langle m|$, где $|n\rangle$ – n-ое возбуждённое состояние и $C_{nm} = \langle n|a + a^+|m\rangle$ – матричный элемент «перекрытия», а – оператор уничтожения ЭМ-поля.

Основное уравнение модели Дике получается после взятия частичного следа по степеням свободы термостата.

Исследование выполнено при поддержке гранта НИТУ МИСИС № К2-2022-025 в рамках программы Стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (Стратегический проект «Квантовый интернет»).

Литература

1. S. I. Mukhin, N. V. Gnedilov, Phys.Rev. A, **97(5)**, 2018
2. P. Rabl, D. De Bernardis, T. Jaako, Phys.Rev. A, **97(4)**, 2018
3. S. I. Mukhin, S. S. Seidov, Ann.Phys. **456** (2023)

СТРУКТУРА НЕАФФИННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ В АМОРФНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Конюх Д. А., Бабин Д. В., Бельтюков Я. М.
ФТИ им. А.Ф. Иоффе
ybeltukov@gmail.com

Аморфные тела отличаются от кристаллических отсутствием дальнего порядка. К таким вещества относятся как стекла (например, аморфный SiO_2), так и аморфные полупроводники (например, аморфный кремний) и ряд полимеров (полистирол и др.).

Наличие беспорядка в аморфных веществах приводит к ряду существенных отличий в упругих и колебательных свойствах аморфных тел. В первую очередь, наличие беспорядка приводит к неприменимости континуальной теории упругости на микроскопических масштабах. Однородное механическое напряжение приводит к появлению сложной и неупорядоченной структуры смещений отдельных атомов — так называемым неаффинным

деформациям. Структура неаффинных деформаций активно изучается в настоящее время [1-3]. Однако имеется вопрос об универсальности структуры таких деформаций в различных аморфных веществах.

Разные аморфные вещества имеют различные микроскопические взаимодействия. Однако аморфные вещества объединяет тот факт, что они находятся вблизи устойчивого положения равновесия, несмотря на наличие сильного беспорядка. Это позволяет в качестве основного приближения применять теорию случайных матриц и рассматривать ансамбль Вишарта, структура которого гарантирует устойчивость механических систем [4-5].

В рамках ансамбля Вишарта с помощью диаграммной техники были найдены все парные корреляторы неаффинных деформаций. Коррелятор смещений атомов имеет дальнодействующий степенной характер и зависит от размера системы, что соответствует литературным данным [1]. Такой коррелятор слабо связан со структурными особенностями изучаемого вещества. Больше информации можно извлечь из коррелятора ротора неаффинных смещений атомов, который согласно полученной теории имеет вид

$$C_{rot}(r) = A\delta(r) - \frac{B}{r} \exp(-r/\xi).$$

Такой коррелятор состоит из дельта-функции и экспоненциально убывающего вклада, имеющего отрицательный коэффициент. Характерный масштаб ξ , стоящий в экспоненте, описывает масштаб неоднородности исследуемой среды. Таким образом, ротор неаффинных деформаций имеет дельта-коррелированную компоненту (белый шум) и антикорреляцию, спадающую на масштабе неоднородности среды.

Для проверки полученных теоретических результатов были проведены молекулярно-динамические расчеты стекла Леннарда-Джонса, аморфного кремния и полистирола. Для всех исследованных систем был рассчитан коррелятор ротора неаффинных смещений атомов, который в пределах статистической ошибки совпал с полученной теоретической формулой.

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

Литература

1. F. Léonforte, R. Boissière, A. Tanguy, J. P. Wittmer, J.-L. Barrat, Phys. Rev. B, **72**, 224206, **2005**
2. M. Baggio, M. Landry, A. Zacccone, Phys. Rev. E **105**, 024602, **2022**

3. W. Jin, A. Datye, U. D. Schwarz, M. D. Shattuck, C. S. O’Hern, *Soft Matter* **17**, 8612, **2021**
4. D. A. Conyuh, A. A. Semenov, Y. M. Beltukov, *Phys. Rev. E* **108**, 045004, **2023**
5. D. A. Conyuh, Y. M. Beltukov, *Phys. Rev. B* **103**, 104204, **2021**

ИЗУЧЕНИЕ МАГНИТНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ВЫЗВАННЫХ ИЗМЕНЕНИЕМ СРЕДНЕЙ ВАЛЕНТНОСТИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНОВ В РЯДУ $Tb_{1-x}Yb_xNiC_2$

Боков А. В.¹, Сидоров В. А.¹, Богач А. В.², Саламатин Д. А.¹,
Краснорусский В.Н.¹, Зибров И. П.¹, Цвященко А. В.¹

¹*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН*

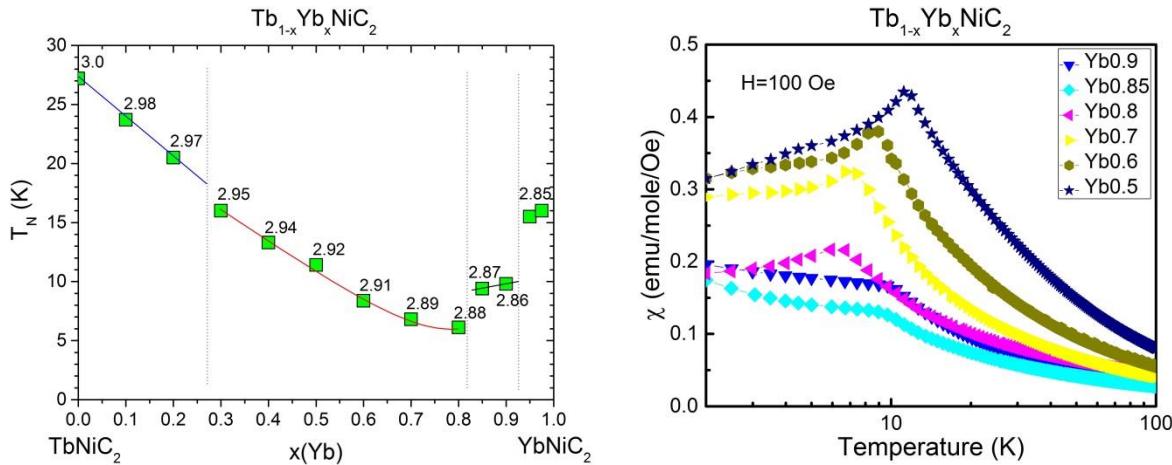
²*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН*

E-mail: bokov@hppi.troitsk.ru

Известно, что соединение $TbNiC_2$ упорядочивается антиферромагнитно при $T_N = 25$ К с моментами Tb , параллельными оси c [1], и имеет валентность 3.0 для ионов Tb . С другой стороны $YbNiC_2$ находится в смешанно-валентном состоянии при нормальном давлении и проявляет поведение Кондо при валентности 2.85 для ионов Yb . Расчёты показывают, что увеличение давления до 37 ГПа подавляет поведение Кондо и уже при валентности 2.88 появляется антиферромагнетизм [2].

В нашей работе были синтезированы поликристаллические образцы $Tb_{1-x}Yb_xNiC_2$ ($x=0 - 0.975$) плавлением Tb , Yb , Ni и C при 8 ГПа и $T=1500-1700$ К в ячейке высокого давления типа «Тороид» [3]. Чистота исходных элементов составила 99.9% для Tb , 99.7% для Yb , 99.9% для Ni и 99.99% для C . Кристаллическая структура образцов $Tb_{1-x}Yb_xNiC_2$ ($x=0 - 0.975$) исследовалась на дифрактометре HUBER (G670) с излучением $Cu-K\alpha_1$ ($\lambda = 1.540$ Å) в режиме пропускания при нормальных условиях давления и температуры. Анализ дифрактограмм методом Ритвельда показал, что полученные соединения из ряда $Tb_{1-x}Yb_xNiC_2$ кристаллизовались в ромбической пространственной группе *Amm2* (структурный тип $CeNiC_2$). Определены зависимости параметров решётки a , b , c и объема элементарной ячейки V от концентрации Yb в системе $Tb_{1-x}Yb_xNiC_2$. С

ростом концентрации Yb параметры решётки a , b , c и объем элементарной ячейки V уменьшаются.



Нами проведены измерения намагниченности в зависимости от магнитного поля, а также магнитной восприимчивости, электрического сопротивления в зависимости от температуры для ряда $Tb_{1-x}Yb_xNiC_2$. На рисунке слева представлена зависимость температуры Нееля (T_N) от концентрации Yb в системе $Tb_{1-x}Yb_xNiC_2$. Видно, что пик магнитной восприимчивости (рисунок справа), соответствующий T_N , монотонно смещается вниз по температуре с ростом x . Но для $x = 0.85$ и $x = 0.9$ зависимости магнитной восприимчивости от температуры больше не имеют пиков при T_N . Вместо пиков имеются размытые изломы при температурах 9.4 K и 9.9 K, где магнетизм в системе ещё существует. Для составов с концентрацией $x = 0.95$ и $x = 0.975$ почти незаметные аномалии восприимчивости наблюдаются при температурах около 15 K, которая очень близка для $YbNiC_2$ при высоком давлении [2]. При этом зависимость электрического сопротивления от температуры для этих составов демонстрирует типичное Кондо поведение, аналогичное для $YbNiC_2$ [2]. Существование эффекта Кондо, а также смешанного с ним магнитного состояния подтверждается и валентным состоянием редкоземельных ионов в изучаемом ряду (см. рисунок). В предельном случае ($x = 1$) магнетизм в системе $Tb_{1-x}Yb_xNiC_2$ исчезает.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№22-12-00008).

Литература

1. N. Uchida et al., Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **145**, L16, 1995

2. D. A. Salamatin et al., Physical Review B, **103**, 235139, **2021**
3. L. G. Khvostantsev et al., High Pressure Research, **24**, 371, **2004**

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ С МАЛЫМ ЧИСЛОМ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ ЖИДКОЙ ФАЗЫ МЕДИ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Боярских К. А., Хищенко К. В.

Объединенный институт высоких температур РАН

boyarskikh.ka@phystech.edu

В настоящей работе рассматривается простая модель уравнения состояния металла. С помощью этой модели построено описание термодинамических свойств жидкой фазы меди в форме уравнения состояния с малым числом параметров (индивидуальных констант).

Термодинамический потенциал свободная энергия как функция удельного объема и температуры для конденсированного вещества формулируется в рамках квазигармонического приближения. Для определения входящих в формулы констант привлекаются данные экспериментов при высоких давлениях.

На основе используемой модели рассчитаны термодинамические параметры границ области фазового равновесия жидкость—пар. Продемонстрировано хорошее согласие с имеющимися опытными данными по давлению насыщенных паров рассматриваемого металла. Также достигнуто хорошее описание опытных данных по тепловому расширению расплава при высоких температурах. По полученному уравнению состояния рассчитаны ударные адиабаты для образцов различной начальной плотности и изоэнтропы расширения ударно-сжатых образцов меди; результаты расчетов хорошо согласуются с данными ударно-волновых регистраций.

Разработанное уравнение состояния жидкого металла может быть использовано при моделировании процессов при высоких давлениях.

«СТРЕЛА ВРЕМЕНИ» В МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ВСЕЛЕННОЙ

Бражкин В.В.

ИФВД РАН

brazhkin@hppi.troitsk.ru

Обсуждается связь наличия во Вселенной метастабильных объектов с различным «временем жизни» с ростом энтропии и «стрелой времени». Конечное «время жизни» метастабильных объектов позволяет приписать многим из них существование собственных «локальных часов». Распад любой метастабильной системы во Вселенной приводит к образованию более стабильных объектов и к испусканию фотонов и других частиц. Эти фотоны и частицы взаимодействуют с частицами более стабильных подсистем во Вселенной, что приводит к их эргодичности. Испускание фотонов в расширяющейся Вселенной при распаде метастабильных состояний делает эти процессы необратимыми и задает «стрелу времени», несмотря на обратимость физических уравнений, описывающих данные процессы.

Работа выполнена при поддержке РНФ 24-12-00037

ЭНТРОПИЯ ФУНКЦИИ ВИГНЕРА ДЛЯ СЛУЧАЯ АБСОЛЮТНО УПРУГОГО СТОЛКНОВЕНИЯ ДВУХ ЧАСТИЦ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ

Бурков И. Д.¹, Сеидов С. С.^{2,1}

¹*НИТУ «МИСИС», г. Москва, Россия*

²*НИУ «ВШЭ», г. Москва, Россия*

masterofphysic@mail.ru

Данная работа посвящена исследованию энтропии функции Вигнера частиц, совершающих абсолютно упругое столкновение. Процесс упругого соударения можно описать гамильтонианом Либа-Линигера. При анализе данного гамильтониана выясняется, что соударяющийся одномерный Бозе газ ведёт себя аналогично невзаимодействующему Ферми газу [1].

Между функцией Вигнера и матрицей плотности существует связь, которая выражает след матрицы плотности через интегрирование функции Вигнера и тем самым позволяет описать энтропию фон Неймана в формализме функции Вигнера. Однако, согласно теореме Хадсона, функция Вигнера неотрицательна только для состояния, соответствующего свободным частицам. По этой

причине энтропию фон Неймана некорректно использовать для описания частиц в квантовой яме.

Существует несколько подходов определить энтропию функции Вигнера, принимающей отрицательные значения. Самыми известными являются энтропия Верля и энтропия Цаллиса. Проблема первого подхода в том, что там искусственно обрезаются отрицательные значения функции Вигнера, поэтому в данной работе будет применяться более общий подход энтропии Цаллиса [2].

В результате данной работы был проанализирован процесс абсолютно упругого столкновения двух частиц в разных постановках. Расчёт показал, что энтропия столкновения двух свободных частиц не убывает после столкновения, когда как в случае двух частиц в квантовой яме энтропия циклически изменяется, причём наименьшие значение принимает во время взаимодействия частиц друг с другом или со стенками. Это позволяет говорить о том, что абсолютно упругое соударение влияет на локализацию квантового состояния частиц.

Литература

1. Minguzzi A., Vignolo P. Strongly interacting trapped one-dimensional quantum gases: Exact solution //AVS Quantum Science. – 2022. – Т. 4. – №. 2.
2. Manfredi G., Feix M. R. Entropy and Wigner functions //Physical Review E. – 2000. – Т. 62. – №. 4. – С. 4665.

КРИТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА СПИН-БОЗОННОЙ МОДЕЛИ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ МАЙОРАНОВСКИХ ФЕРМИОНОВ

Васин М. Г.^{1,2}, Ремизов С. В.^{1,3,4}, Елистратов А. А.¹

¹Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н.Л. Духова, Москва, Россия

² Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия

³Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова, РАН, Москва, Россия

⁴Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия

E-mail: dr_vasin@mail.ru

В работе исследуются низкоэнергетические свойства спин-бозонной модели (СБМ), описывающей динамику двухуровневой квантовой системы (примеси со спином 1/2, или кубита), связанной с

термостатом, представляющим собой ансамбль независимых гармонических осцилляторов. Теоретическое описание построено в технике Келдыша-Швингера, основанной на представлении $1/2$ -спина фермионами Майораны. Предварительно рассматриваются технические аспекты выбранного подхода, и проводится его анализ с целью верификации в сравнении с другими методами. Показано, что данный подход воспроизводит все основные соотношения, включая форму пика, полученную в подходе Блоха-Редфилда. За тем анализируется поведение системы для различных спектров бозонного теплового резервуара, $f(\omega) \sim \omega^s$. С помощью ренормгруппового метода показано, что в омическом, $s=1$, и субомическом, $0 < s < 1$, режимах в системе происходит динамический фазовый переход, проявляющийся в смене между режимами когерентных осцилляций и некогерентного затухания. Определены температурные зависимости критического значения параметра связи спина с бозонным тепловым резервуаром и времени когерентности в субомическом режиме.

РОЛЬ Mn В СТАБИЛИЗАЦИИ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ LaFe_{11.2-x}Mn_xCo_{0.7}Si_{1.1} В ПЕРЕМЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

*Гамзатов А.Г., Н.З. Абдулкадирова, А.М. Алиев,
Институт Физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, г. Махачкала,
Россия
gamzatov_adler@mail.ru*

В данной работе приводятся результаты исследования замещения Mn в системе LaFe_{11.2-x}Mn_xCo_{0.7}Si_{1.1} ($x=0.1, 0.2, 0.3$) на магнитные свойства и на стабильность адиабатического изменения температуры в циклических магнитных полях. В частности, приводятся результаты исследования намагниченности и магнитострикции в импульсных магнитных полях до 180 кОе. Прямые измерения адиабатического изменения температуры ΔT_{ad} в циклических магнитных полях: влияние частоты циклического магнитного поля на величину ΔT_{ad} , и влияние долговременного воздействия циклического магнитного поля на величину и стабильность ΔT_{ad} .

На рис. 1(а) представлены температурные зависимости МКЭ в LaFe_{11.2-x}Mn_xCo_{0.7}Si_{1.1} ($x=0.1, 0.2, 0.3$) при различных частотах изменения магнитного поля с амплитудой 12 кОе. Величина эффекта

для $x=0.1$ на частоте 1 Hz составляет 2.07 K, а на частоте 20 Hz - 1.72 K, т. е. наблюдается уменьшение эффекта с ростом частоты циклического поля примерно на 17%. Как видим, из рис.1(a), увеличение концентрации марганца приводит к частотной стабилизации ΔT_{ad} . То есть уменьшение МКЭ при увеличении частоты циклического магнитного поля до 20 Hz приводит к уменьшению эффекта на 8.3 % и 10.6 % для образцов с $x=0.2$ и 0.3, что заметно меньше чем для образца с $x=0.1$. Уменьшение амплитуды ΔT_{ad} с ростом частоты циклического магнитного поля, наряду с типом фазового перехода, структурной и фазовой неоднородностью образца может зависеть и от скорости развертки магнитного поля.

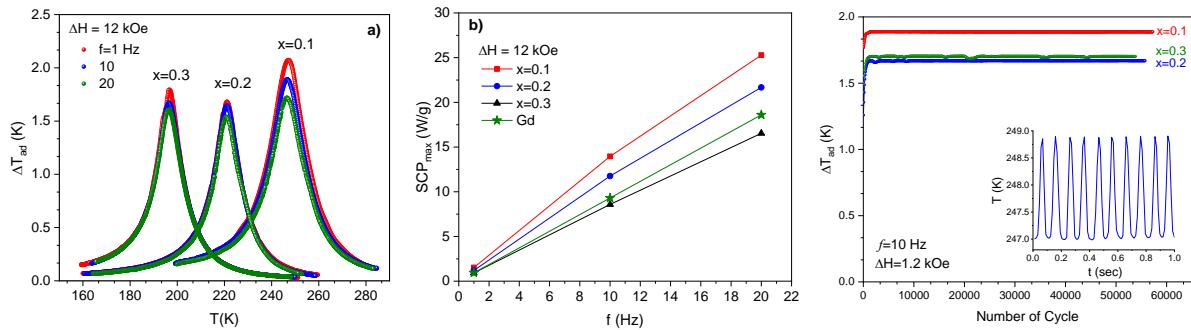


Рис.1. a) Температурные зависимости ΔT_{ad} для $\text{LaFe}_{11.2-x}\text{Co}_{0.7}\text{Mn}_x\text{Si}_{1.1}$ в циклическом магнитном поле 12 kOe при $f=1, 10$ и 20 Гц. b) Частотная зависимость максимума Q_c для сплавов $\text{LaFe}_{11.2-x}\text{Co}_{0.7}\text{Mn}_x\text{Si}_{1.1}$ в переменном магнитном поле 12 kOe. Зависимость ΔT_{ad} от числа циклов вкл/выкл магнитного поля 12 kOe при $f=10$ Гц вблизи максимумов ΔT_{ad} .

Частотные зависимости ΔT_{ad} можно использовать для получения частотной зависимости охлаждающей способности (Q_c) по формуле $Q_c=f*C_p*\Delta T_{ad}$, где C_p – теплоемкость материала, а f – частота цикла магнитного поля. Как видим, наряду с величиной ΔT_{ad} и его частотной стабильностью, охлаждающая мощность зависит и от теплоемкости материала. Используя значения теплоемкости в магнитном поле вблизи T_c , $C_p \sim 734 \text{ J/kg K}$, 712 J/kg K и 516 J/kg K для $x=0.1, 0.2$ и 0.3 . И данные $\Delta T_{ad}(T,f)$ из рис. 1(a) можно оценить $Q_c(f)$ (см. Рис.1(b)). Там же для сравнения приведены значения Q_c для Gd при 20 Hz (с $C_p \sim 280 \text{ J/kg K}$). Наибольшая величина Q_c при $f=20$ Hz равна 25.28 W/g и наблюдается для состава с $x=0.1$. Данное значение больше, чем для Gd, для которого при тех же условиях $Q_c= 18.6 \text{ W/g}$. Увеличение значения Q_c с ростом частоты для всех исследованных образцов позволяет говорить о том,

что эффективность охлаждения можно существенно повысить за счет увеличения рабочей частоты в условиях достаточной теплоотдачи.

Не менее важным требованием к магнитокалорическим материалам является стабильность, т.е. независимость ΔT_{ad} от продолжительности воздействия переменного магнитного поля. Результаты исследования долговременного воздействия циклического магнитного поля 12 kOe при частоте 10 Hz на величину ΔT_{ad} показывают стабильность эффекта (без признаков деградации) вплоть до 60000 циклов вкл/выкл (см. рис.1(с)). Данный факт является принципиально важным с точки зрения применимости этих материалов в технологии магнитного охлаждения, где наряду с большим МКЭ, важна и стабильность эффекта в циклических полях.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 24-43-00156, <https://rscf.ru/en/project/24-43-00156/>.

ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ ГЕЛИКОИДАЛЬНЫХ И ХОЛДЕЙНОВСКИХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

Гиппиус А. А.^{1,2}

¹ Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

² ФИАН им. П.Н. Лебедева

e-mail: *gippius@mail.ru*

В первой части доклада рассматриваются применение метода ЯМР спектроскопии к исследованию спиновой структуры бинарного гелимагнетика FeP и ее эволюции в магнитном поле и при замещении фосфора на мышьяк. Фосфид железа FeP принадлежит к большому семейству монопниктидов переходных металлов, наиболее интересной особенностью которых является формирование геликоидальной магнитной структуры, обнаруженной у четырех соединений: FeP, FeAs, MnP и CrAs [1]. С помощью ЯМР экспериментов на монокристалле FeP [2] установлено, что спектры ЯМР ^{31}P описываются двумя парами магнитно-неэквивалентных атомов фосфора, формирующих две плоскости несоразмерного геликоидального распределения локальных магнитных полей с углом 47° между ними, что хорошо согласуется с данными рассеяния нейtronов [1].

Обнаружено существование спин-реориентационного перехода в геликоидальной спиновой структуре FeP в диапазоне магнитных полей 4–7 Тл, сопровождающегося перераспределением сверхтонких локальных полей на фосфоре.

Анализ мёссбауэровских спектров $\text{FeP}_{1-x}\text{As}_x$ ($x = 0.33$ и 0.50) показывают, что магнитная структура практически не изменилась относительно FeP. Однако, спектры ЯМР ^{31}P кардинально отличаются от образцов с $x = 0$ и 0.10 : вместо широких асимметричных двугорбых линий, характерных для геликоидальных спиновых структур, в диапазоне магнитных полей $0 - 9$ Тл наблюдаются относительно узкие гауссовые линии, т.е. гелиомагнитная структура в $\text{FeP}_{1-x}\text{As}_x$ ($x = 0.3, 0.5$) на ядрах ^{31}P не проявляется. Вместо формирования геликоидальной спиновой структуры с дальним порядком, в диапазоне $T \sim 20 - 30$ К наблюдается плавный переход в состояние типа спинового стекла, где роль отдельных спинов играют конечные фрагменты магнитных геликоид со случайным набором длин и фазовых углов.

Во второй части доклада рассматриваются однородные изолированные цепочки спинов $S = 1$ с антиферромагнитным взаимодействием, описываемые моделью Холдейна. В отличие от случая спинов $S = 1/2$, Холдейновская цепочка спинов $S = 1$ защищена от внешних возбуждений энергетической щелью Δ , отделяющей синглетное ($S = 0$) основное состояние от возбужденных триплетных состояний ($S = 1$) что делает основное состояние такой системы устойчивым [3]. Холдейновские цепочки довольно редко встречаются в природе, и большинство из них построено на магнитных ионах Ni^{2+} ($3d^8$). Известны всего две Холдейновские системы, построенные на ионах V^{3+} ($3d^2$) со спином $S = 1$: AgVP_2S_6 и $\text{Ba}_2\text{V}(\text{VO}_4)_2(\text{OH})$ [3]. В настоящей работе представлены результаты исследования двух новых Холдейновских систем на основе ионов V^{3+} : металлоорганического магнетика $(\text{enH}_2)_{0.5}\text{VPO}_4\text{OH}$ (enH_2 = di-protonated ethylenediamine) и его неорганического аналога $\text{NH}_4\text{VPO}_4\text{OH}$. В этих системах ионы V^{3+} в октаэдрической конфигурации VO_6 образуют практически изолированные цепочки спинов $S = 1$ вдоль кристаллической оси b .

С помощью измерений намагниченности, теплоемкости и ЯМР на ядрах ^{31}P установлено, что в обеих системах не наблюдается магнитного дальнего порядка вплоть до 1.5 К, и что они проявляют свойства Холдейновских магнетиков со щелью $\Delta = 59.3$ К (40 К) для $(\text{enH}_2)_{0.5}\text{VPO}_4\text{OH}$ ($\text{NH}_4\text{VPO}_4\text{OH}$). Эти значения хорошо согласуются с теоретической оценкой внутрицепочечного интеграла обменного взаимодействия $J \sim 100$ К. При этом значения Δ , определенные из ЯМР

экспериментов в поле 9 Тл, оказались несколько меньше: 48.4 К и 34.6 К для $(enH_2)_{0.5}VPO_4OH$ и NH_4VPO_4OH , соответственно, что свидетельствует о частичном закрытии Холдейновской щели в магнитном поле. Результаты измерений спин-решеточной релаксации свидетельствуют о том, что при понижении температуры ниже $T_{s-G} \approx 3 - 4$ К в обеих системах происходит формирование основного состояния типа спинового стекла за счет неспаренных спинов $S = 1/2$ на концах Холдейновских цепочек [1].

Литература

1. G. P. Felcher et al., Phys. Rev. B, **3**, 3046, **1971**.
2. A. A. Gippius et al., Phys. Rev. B, **102**, 2014416, **2020**.
3. F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett., **50**, 371, **1983**.
4. O. V. Maximova et al., Crit. Rev. Solid State Mater. Sci., **46**, 383, **2021**.

НОВЫЙ МЕХАНИЗМ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В СЛОИСТЫХ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛУМЕТАЛЛАХ

П.Д. Григорьев^{1,2,3}, И.Р. Шеин⁴, А.В. Садаков⁴, О.А. Соболевский⁴,
Н.С. Павлов⁵, И.А. Некрасов⁶, Е. Мальцев⁷, В. М. Пудалов⁴

¹*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН,
Черноголовка, Россия*

²*НИТУ «МИСиС», Москва, Россия*

³*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова
РАН, Москва, Россия*

⁴*Научный центр В.Л. Гинзбурга Физического института им. П. Н.
Лебедева РАН, Москва 119991, Россия*

⁵*Институт электрофизики РАН, Екатеринбург, 620016, Россия*

⁶*Институт химии твердого тела РАН, Екатеринбург, 620990, Россия*

⁷*Институт исследований твердого тела и материалов им. Лейбница,
IFW, 01069 Дрезден, Германия
e-mail: grigorev@itp.ac.ru*

Слоистые топологически нетривиальные и тривиальные полуметаллы с антиферромагнитным (АФМ) упорядочением магнитной подрешетки обладают отрицательным магнитосопротивлением, которое хорошо коррелирует с изменением АФМ намагниченности в магнитном поле. Об этом эффекте

сообщалось в ряде экспериментальных исследований с EuFe_2As_2 [1], EuSn_2As_2 [2], EuSn_2P_2 [3], EuIn_2As_2 [4] и др., где сопротивление квадратично уменьшается с увеличением поля на величину около $\delta\rho/\rho \sim 4\text{--}6\%$ вплоть до поля спин-флип. Несмотря на то, что этот эффект хорошо документирован экспериментально, его теоретическое объяснение до сих пор отсутствует. Мы предлагаем [5] новый теоретический механизм, описывающий наблюдаемое магнитосопротивление и не предполагающий ни его топологического происхождения, ни шероховатости поверхности, ни их потенциальной дефектной структуры, ни электрон-магнонного рассеяния. Этот новый механизм связан с нарушением симметрии между АФМ подрешетками и соответствующим изменением координатной зависимости волновых функций электронов проводимости для спиновых подзон, которая сжимает волновые функции и усиливает рассеяние электронов на точечных дефектах. Проведенные численные расчеты методом функционала плотности подтверждают это сжатие. Предложенный механизм магнитосопротивления применим к широкому классу слоистых АФМ-упорядоченных полуметаллов. Мы также провели детальное экспериментальное исследование этого эффекта в EuSn_2As_2 и сравнили его с нашими теоретическими предсказаниями. Рассчитанное магнитосопротивление хорошо согласуется с экспериментальными данными для кристаллов различного состава.

Работа поддержана грантом РНФ №22-42-09018.

1. J.J. Sanchez, G. Fabbris, Y. Choi et al., *Phys. Rev. B* **104**, 104413 (2021).
2. Huijie Li, Wenshuai Gao, Zheng Chen et al., *Phys. Rev. B* **104**, 054435 (2021).
3. Xin Gui, Ivo Pletikosic, Huibo Cao, et al., *ACS Centr. Sci.* **5**(5), 900 (2019).
4. F. H. Yu, H. M. Mu, W. Z. Zhuo, et al. *Phys. Rev. B* **102**, 180404(R) (2020).
5. P. D. Grigoriev, N. S. Pavlov, I. A. Nekrasov et al., arXiv:2405.18046

ОГРАНИЧЕННЫЙ И НЕОГРАНИЧЕННЫЙ РОСТ ВОЗМУЩЕНИЙ С РИФЛЁНОЙ СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ УДАРНОМ НАГРУЖЕНИИ МЕТАЛЛОВ

Григорьев С. Ю., Дьячков С.А., Паршиков А.Н., Жаховский В.В.
Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им.
Н.Л. Духова (ВНИИА)
Россия, 127030, Москва, Сущевская ул., д.22

Методом гидродинамики сглаженных частиц (SPH – smoothed particles hydrodynamics) исследуется неустойчивость Рихтмайера-Мешкова, развивающаяся на границе раздела твердое тело-вакуум в результате ударного нагружения металлических образцов. SPH-моделирование проведено для образцов алюминия, меди и тантала, свободная поверхность которых имеет рифление в виде синусоиды. Полученные результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными для различных режимов нагружения. Моделирование демонстрирует три режима реакции материала на ударное нагружение, где условия зависят от предела текучести при данной скорости деформации. При относительно слабых ударах, рифленая поверхность испытывает только сдвиговые колебания. При более интенсивном ударном нагружении возникает пластическая деформация, приводящая к формированию возмущений ограниченной амплитуды. Установлено, что после остановки пластического движения образовавшийся спайк колеблется с тем же периодом, что и в упругом режиме. Наконец, большая нагрузка вызывает неограниченный рост пластической или жидкой струи, что приводит к ее фрагментации в более поздние моменты времени. Переход от ограниченного к неограниченному росту струи зависит от геометрии гофрированной поверхности. В работе мы оцениваем критическую амплитуду начальных возмущений, необходимую для их неограниченного роста. Показано, что используемые методы моделирования позволяют с хорошей точностью определить механические свойства материалов в условиях высоких скоростей деформации.

СВЕРДЛОВСК И СТАНОВЛЕНИЕ АТОМНОГО ПРОЕКТА СССР

С.А.Гудин

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

В работе освещается вклад сотрудников научных и образовательных учреждений г. Екатеринбурга в первый этап Атомного проекта СССР [1]. Вклад этот малоизвестен, в основном в связи с переводом привлекаемых в Атомный проект на работу в такие специально создаваемые учреждения, как Лаборатория № 2 АН СССР, Уральский электрохимический комбинат (г. Новоуральск), КБ-11 (РФЯЦ-ВНИИЭФ) г. Саров. Основная часть доклада посвящена описанию разрешения одной из труднейших задач, вставших перед разработчиками атомного щита СССР, - промышленное разделение изотопов урана. Так в Екатеринбурге в 1943 г. под руководством И.К. Кикоина начались первые работы по разделению изотопов при помощи методов диффузии и центрифугования. И.К. Кикоин был назначен заместителем И.В. Курчатова и являлся основным ответственным за разработку промышленного метода получения урана-235. В докладе И.В. Сталину за подписью Л.П. Берия, Б.Л. Ванникова, А.П. Завенягина, И.В. Курчатова, Ю.Б. Харитона и К.И. Щелкина «О ходе выполнения заданий на 1951 год и о программе работ по развитию атомной промышленности в 1951— 1955 гг.» от 16 ноября 1951 г. (С.347 в [2]) подводятся некоторые итоги, характеризующие сложность задачи по производству урана-235: «*Получение урана- 235 диффузионным методом явилось одной из наиболее сложных задач. Работа над проблемой получения урана- 235 диффузионным методом была начата с создания в 1946 году машин производительностью 8 граммов в секунду. Ученым, конструкторам и инженерам было необходимо создать несколько типов сложных диффузионных машин, полностью герметизированных и безостановочно работающих при глубоком вакууме. Необходимо было также изыскать для этих машин коррозиестойчивые материалы, не подвергающиеся действию химически высокоактивного рабочего газа - соединения урана с фтором. Выполненные за истекшие годы учеными- физиками, химиками и конструкторами большие работы позволили в 1951 году организовать промышленный выпуск диффузионных машин*

производительностью 1200 и 2200 граммов в секунду, обеспечивших значительное увеличение выпуска урана- 235». Еще более трудной являлась задача получение урана методом центрифугования, если при создании диффузионных машин, можно было опираться на разработки в США и Великобритании, то разработка центрифужного метода разделения опередила на несколько десятилетий мировую ядерную промышленность.

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

Литература

1. Гудин С.А. Сотрудники Института физики металлов УрО РАН и становление атомного проекта СССР, УФН (принята в печать), **2024**
2. АТОМНЫЙ ПРОЕКТ СССР: Документы и материалы: В 3 т. / Под общ. ред. Л.Д. Рябева. Т. II. Атомная бомба. 1945- 1954. Книга 7 / Федеральное агентство РФ по атом, энергии; Отв. сост. Г. А. Гончаров. - Саров: РФЯЦ- ВНИИЭФ; М: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 696 с. ISBN 978-5-9221-0855-3 (Т. II; Кн. 7)
https://elib.biblioatom.ru/text/atomny-proekt-sssr_t2_kn7_2007/p342/

МЕХАНИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СЛОИСТОГО КРИСТАЛЛА CrSBr

Д. Л. Гусенков^{1,2}, Е. И. Куницына¹, Р. Б. Моргунов^{1,2,3}, А. И. Чернов³
¹ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка
²ПМГМУ им. Сеченова, Москва
³Российский квантовый центр, Сколково, Москва

В наноэлектронике перспективно использование двумерных полупроводников в связи с необычной зонной структурой и свойствами носителей заряда. Особенно важными являются те из них, которые сочетают электрические свойства с ферромагнетизмом. Такие материалы могут применяться в логических устройствах спинtronики, а также в квантовых компьютерах, где переключение логического состояния осуществляется с помощью магнитного поля. В данной работе исследуются механические и магнитные свойства CrSBr.

С помощью наноиндентирования были получены диаграммы сила - глубина погружения (P-h диаграммы). Значения, полученные из этих диаграмм, позволили определить значение модуля Юнга (38,4 Гпа) и

твёрдости образца CrSBr (0,68 ГПа). Температурные зависимости намагниченности указывали на существенный сдвиг температуры Нееля, который мог быть вызван нестехиометрией образца и внутренними механическими напряжениями, связанными с наличие дефектов структуры

Для подтверждения химического состава образца были проведены Рамановская спектроскопия, рентгенофлуоресцентный анализ (XRF) и энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия (EDX). Рамановская спектроскопия позволила ориентировать образец.

Работа выполнена в рамках тематической карты Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии № 124013100858-3.

Литература

E. Telford et al, Designing Magnetic Properties in CrSBr through Hydrostatic Pressure and Ligand Substitution, *Adv. Phys. Res.* 2023, 2: 2300036, DOI:10.1002/apxr.202300036.

ПОВЕРХНОСТНАЯ ЛАЗЕРНАЯ АМОРФИЗАЦИЯ ДВУХФАЗНЫХ МИКРОПРОВОДОВ PrDyFeCoB

Дворецкая Е.В., Моргунов Р.Б.

ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН

Dvoretskaya95@yandex.ru

Селективное лазерное плавление (SLM), также известное как технология аддитивного производства, уже используется для печати постоянных магнитов с очень мелкой микроструктурой, программируемой формой и стабильной намагниченностью [1]. О перспективных магнитных свойствах и потенциальном применении микропроводов PrDyFeCoB сообщалось в [2]. Покрытие микромагнитов защитным слоем является важным направлением в разработке микроэлектромеханических систем (MEMS). Особенно актуально совершенствование микромагнитов семейства NdFeB.

В работе обнаружена лазерно-стимулированная поверхностная аморфизация микропроводов PrDyFeCoB. Восстановление аморфной структуры поликристаллических микропроводов под действием одиночного лазерного импульса мощностью 1 mJ и длительностью 120

ns на глубине 1 - 2 mkm. Теплообмен в микропроводе приводит к быстрому охлаждению области лазерного облучения в отличие от объемного образца. Мы создали периодические локальные магнитные метки длиной ~10 mkm одиночными лазерными импульсами. Первоначально кристаллические микропровода $(\text{PrDy})_2(\text{FeCo})_{14}\text{B}_1$ были локально преобразованы в аморфную фазу лазерным облучением. Переменные аморфные магнитные узоры намагниченны перпендикулярно главной оси микропровода. Быстрое нанесение магнитных микрометок позволяет создавать магнитные микросоты, необходимые для MEMS-устройств.

Работа выполнена при поддержке программы ФИЦ «Центр проблем химической физики и медицинской химии РАН» 124013100858-3.

Литература

1. N. Radwan-Pragłowska et al. *Nanomaterials* **14**, 5, 2024.
2. R.B. Morgunov et al. *Mat. Lett.* **273**, 2020.

СПИНОВЫЕ КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ДЕЙСТВИЕ ВЕССА-ЗУМИНО В ЗАДАЧАХ МАГНЕТИЗМА И КВАНТОВОЙ ОПТИКИ

А.А. Елистратов¹, С.В. Ремизов^{1,2,3}, М.Г. Васин^{1,4}

¹*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики
им. Н.Л. Духова, Росатом*

²*Институт радиотехники и электроники
им. В.А. Котельникова, РАН,*

³*Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»*

⁴*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина, РАН*
andrei.a.elistratov@mail.ru

Неабелевость спиновых операторов, как известно, является препятствием для описания спиновых систем в формализме континуального интеграла. Однако, данная сложность может быть преодолена, если по аналогии с когерентными состояниями, являющимися собственными для бозонных операторов уничтожения, ввести спиновые когерентные состояния, которые являются собственными для компонент оператора спина [1]. При записи

статистической суммы спиновой системы в виде континуального интеграла стандартным образом возникает временная часть действия, которая при расчете в базисе спиновых когерентных состояний дает член своеобразного вида – действие Бесса-Зумино, также часто называемое действием Бесса-Зумино-Новикова-Виттена [2].

Действие с временной частью в форме Бесса-Зумино позволяет, стартуя с микроскопического гамильтониана спиновой системы, прийти к среднеполевому уравнению, например, к уравнению Ландау-Лифшица с затуханием в форме Гильберта [3]. Интересный пример – квантовая точка, обладающая спином и связанная с тепловым фермионным резервуаром. Новым результатом в данном примере является геометрический характер шумов, открытый авторами работы [4].

Пример из квантовой оптики – двухуровневая система, взаимодействующая с фотонами теплового резервуара, например, резонатора или линии. Аппарат континуального интеграла с учетом действия Бесса-Зумино приводит к среднеполевому уравнению Блоха-Бломергена.

Действие Бесса-Зумино имеет негауссов вид, что является препятствием к построению диаграммной техники, основанной на варьировании производящего функционала по источникам. Тем не менее, именно действие Бесса-Зумино является недостающим элементом, объединяющим спиновую диаграммную технику [5] и континуальное интегрирование по спиновым полям в единую теоретическую конструкцию.

Наиболее интересной и привлекательной особенностью действия Бесса-Зумино является то, что данное действие и связанная с ним фаза Берри являются точкой входа для топологического анализа многих современных систем и эффектов, таких как спиновые жидкости, дробный квантовый эффект Холла и др. [2].

Литература

1. L. Schulman, Phys. Rev., **176** 1558 (1968)
2. S. Sachdev, Quantum phase transitions, Cambridge university press, 2011.
3. С.В. Демишев, Тезисы XXII Всероссийской конференции «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений», с. 61 (2023).
4. A. Shnirman et al, PRL 114 176806 (2015).
5. Ю.А. Изюмов, Ф.А. Кассан-оглы, Ю.Н. Скрябин, Полевые методы в теории ферромагнетизма, Наука, Москва, 1974.

ТЕРМИЧЕСКИ УСТОЙЧИВЫЙ РАСТВОР МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА В СИЛИКАТЕ МАГНИЯ

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

Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН

efimchen@issp.ac.ru

Взаимодействие водорода с силикатами при высоких давлениях реализуется во многих геологических и астрофизических системах. Например, подобное взаимодействие может происходить в экзопланетах относящихся к классу субнептунов и приводить к преобладанию в их коре и мантии гидридов и растворов водорода [1]. Одним из способов оценки энергии связи молекулы H_2 с атомами решетки и кинетической устойчивости гидрида при разных температурах является определение энергии активации выхода водорода из вещества.

Для изучения влияния катионов магния на устойчивость твердых растворов молекулярного водорода аморфные силикаты $Mg_{0.6}SiO_{2.6}$ и $Mg_{0.49}SiO_{2.49}$ были насыщены до 0.34 и 0.35 молей H_2 при давлении водорода 7.5 ГПа и температуре 250 °C, по методике, описанной в работе [2]. Кинетика распада растворов при нормальном давлении изучалась методом измерения интенсивности вибронной линии H_2 в спектрах КРС от времени при температурах $T=293\text{--}335$ К. Полученные постоянные времени τ распада раствора $Mg_{0.6}SiO_{2.6}\text{-}0.34H_2$ от обратной температуры $1/T$ показаны на рисунке 1. Используя эту зависимость, было установлено, что энергия активации распада раствора $E_A=621$ мэВ. Полученное значение указывает на усиления взаимодействия молекулы H_2 с решеткой, аналогичное наблюдавшимся ранее для раствора водорода в литий-силикатном стекле [3]. На данный момент это наибольшее значение активационного барьера для выхода молекулы H_2 из вещества растворителя, которое приводит к высокой устойчивости твердого раствора H_2 при комнатной температуре.

В то же время, для раствора в силикате с меньшим содержанием магния $Mg_{0.49}SiO_{2.49}\text{-}0.35H_2$ величина энергии активации распада $E_A=160$ мэВ, что совпадает с полученным ранее значением энергии активации распада раствора водорода в кварцевом стекле [4]. Мы предполагаем, что такая большая разница в величинах энергий активации распада растворов связана с неравномерным распределением катионов магния в аморфном силикате $Mg_{0.49}SiO_{2.49}$ и

образованием в нем областей аморфного SiO_2 , через которые происходит диффузия и выход водорода.

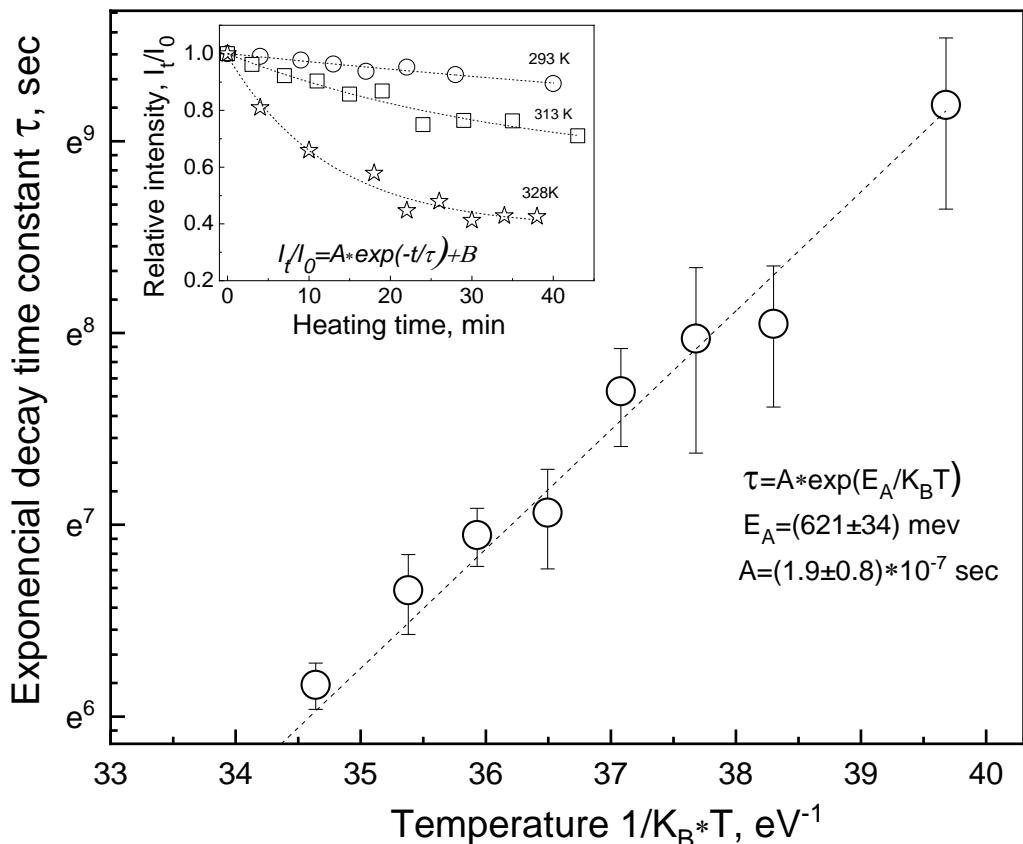


Рисунок 1. (Врезка) Изменение интенсивности вибронной линии молекулярного водорода в растворе $Mg_{0.6}SiO_{2.6} \cdot 0.34H_2$ в зависимости от времени отжига при различных температурах. (Основная часть рисунка) Экспоненциальные постоянные времени распада τ от обратной температуры (пустые круги). Пунктирные линии показывают аппроксимацию экспериментальных данных.

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

Литература

1. T. Kim, X. Wei, S. Chariton, et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U S A., **120**, 52, **2023**
2. V. S. Efimchenko, et al. J. Alloys Comp., **770**, 229, **2019**
3. V. S. Efimchenko, et al. J. Phys. Chem. C, **127**, 13538, **2023**
4. K. P. Meletov, V. S. Efimchenko, Chem. Phys. Lett., **793** 139477, **2022**

ФОРМИРОВАНИЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОЛОСТИ В КРИСТАЛЛЕ LiF РЕНТГЕНОВСКИМ ИМУЛЬСОМ

Жаховский В. В., Григорьев С. А., Перов Е. А.

Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им.

Н.Л. Духова Росатом, 127030 Москва

basilz@ya.ru

Субпикосекундная оптическая лазерная обработка металлов активно используется для модификации тонкого нагретого поверхностного слоя. Но для более глубокой модификации различных материалов необходим лазер, работающий в диапазоне жесткого рентгеновского излучения. Недавно было продемонстрировано, что при облучении кристалла LiF лазером на свободных электронах [1], одиночный рентгеновский импульс с фотонами 9 кэВ может сформировать цилиндрическую полость диаметром ~ 1 мкм и длиной ~ 1 мм, окруженную ударно-трансформированным материалом. Созданный этим импульсом плазменный канал генерирует расходящуюся цилиндрическую ударную волну (УВ) с давлением на уровне ~ 1 ТРа, которая может приводить к повреждению, плавлению и полиморфным превращениям любых исследуемых материалов, в том числе непрозрачных для обычных оптических лазеров.

Мы провели анализ формирования и распространения волн давления в LiF с помощью континуального моделирования методом сглаженных частиц (SPH) и атомистического моделирования методом молекулярной динамики (MD). Было выявлена последовательность процессов, приводящих к конечной структуре с длинной полостью. В частности, MD расчет показывает формирование начально канала с горячим веществом малой плотности вследствие радиального выноса вещества, вызванного ускорением в расходящейся пластической УВ, повреждающей окружающий холодный материал. Этот канал расширяется и достигает своего максимального размера в течение первых нескольких нс после облучения, как показывают SPH расчеты. Рост радиуса канала прекращается на ~ 3 нс, и после этого радиус остается практически неизменным, и соответствует экспериментальному радиусу полости.

Как показало MD моделирование, после пробега достаточного расстояния от центральной оси пучка лазера, расходящаяся УВ ослабляется и становится чисто упругой. Необратимые повреждения прекращаются и материал начинает упруго сопротивляться

радиальному истечению вещества от центра. Вскоре это течение почти останавливается и практически наступает механическое равновесие между остаточным давлением в горячем канале и упругими напряжениями в окружающем холодном материале. На этом быстрая стадия эволюции заканчивается, и начинается долгая стадия остывания и замерзания расплава в канале.

Мы также провели MD моделирование процесса формирования полости на долгой стадии эволюции, управляемой медленным уносом тепла из горячего расплава в цилиндрическом канале в окружающий холодный кристалл. На этой стадии давление в канале с расплавом снижается из-за охлаждения, а радиус канала остается почти неизменным, так как в окружающем твердом материале действуют упругие напряжения, препятствующие сужению канала. Таким образом, давление в расплаве может стать отрицательным еще до его замерзания, что создает условия для кавитации в канале с образованием полостей или газовых пузырей. В глубокой части канала расплав имеет температуру ниже, чем в верхней части, и поэтому кристаллизация начинается внизу и распространяется вверх по каналу. Скорость движения фронта кристаллизации контролируется степенью переохлаждения расплава, и может превышать скорость звука при достаточно быстром уходе тепла в стенки канала. Было показано что там, где отрицательное давление в расплаве опустилось ниже прочности жидкости на разрыв начинается кавитация. При этом прочность на разрыв падает с ростом температуры расплава, поэтому кавитация распространяется сверху вниз по каналу, навстречу фронту кристаллизации. Наше MD моделирование демонстрирует, что резкая граница дна цилиндрической полости в глубине кристалла LiF, обнаруженная в экспериментах, сформировалась благодаря остановке распространения фронта зарождения кавитационных пузырьков при встрече с фронтом кристаллизации.

Литература

1. S. Makarov, S. Grigoryev, N. Inogamov, et al, Damage threshold of LiF crystal irradiated by femtosecond hard XFEL pulse sequence. Opt. Express. **31**, 26383 (2023)

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТИ НА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В $R_{0.02}Sm_{0.98}B_6$ (R - Eu, Gd, Yb)

В.С. Журкин¹, А.Д. Божко¹, М.А. Анисимов¹, А.В. Богач¹,
Н.Ю. Шицевалова², В.В. Глушков¹

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991, Москва, Россия

² Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАНУ, 03142, Киев, Украина
dok555@mail.ru

Гексаборид самария является классической системой с сильными электронными корреляциями, в которой состояния ионов самария с разным числом валентных 4f-электронов оказываются вырожденными. Нецелочисленная валентность иона самария ($v \approx 2.6$) приводит к частичной делокализации 4f-состояний и флюктуациям магнитного момента. SmB_6 принято относить к топологическим Кондо изоляторам (ТКИ) [1]. Согласно модели ТКИ конечная проводимость SmB_6 определяется поверхностными состояниями электронов с дираковским спектром, возникающими из-за нетривиальной топологии зонной структуры. Однако влияние рельефа и состава поверхности SmB_6 на параметры этих состояний в настоящее время не изучено.

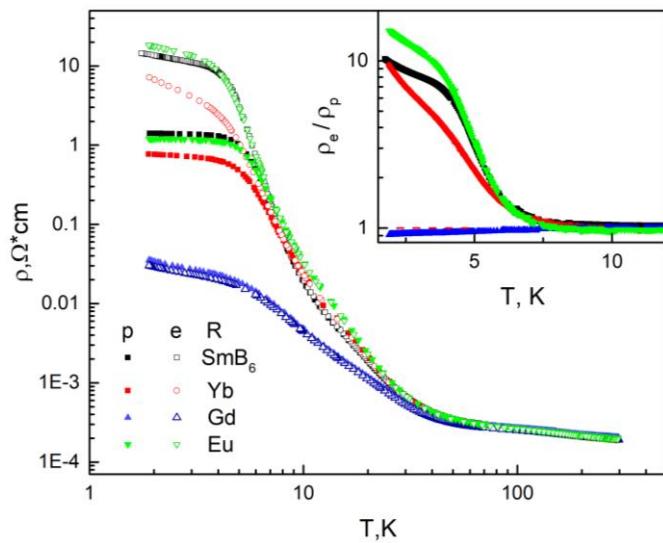


Рис. 1 Температурные зависимости удельного сопротивления $R_{0.02}Sm_{0.98}B_6$ (R – Eu, Gd, Yb), рассчитанные для травленых (e) и полированных (p) образцов. На вставке показано отношение $\rho_e/\rho_p(T)$.

В настоящей работе исследованы твердые растворы замещения на основе SmB_6 с общей формулой $\text{R}_{0.02}\text{Sm}_{0.98}\text{B}_6$ (R – Eu , Gd , Yb). Подготовка поверхности монокристаллов осуществлялась в 2 этапа. Сначала грани образцов полировались при помощи алмазного абразива с последовательным уменьшением зернистости (вплоть до 0,3 мкм). Затем производилось травление граней в водном растворе HNO_3 . Способы подготовки поверхности описаны детально в [2-3]. Для полированных и травленых образцов выполнялись измерения удельного сопротивления ρ и коэффициента Холла R_H при температурах 1.7-300 К в магнитных полях до 8 Тл.

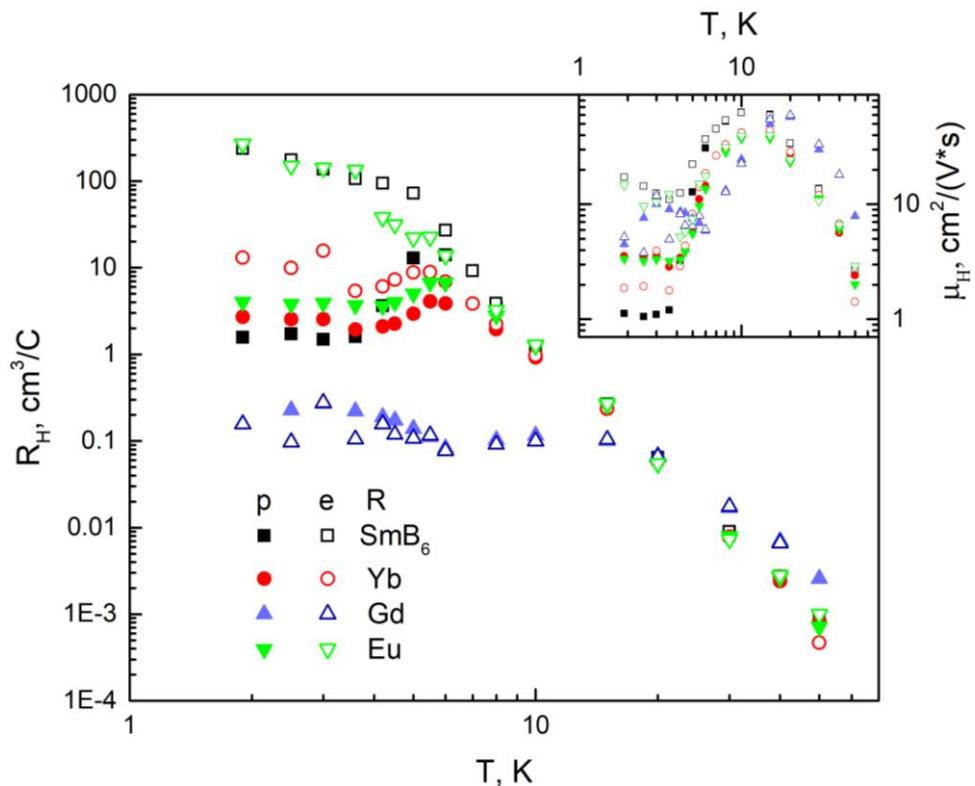


Рис. 2 Температурные зависимости (основная панель) коэффициента Холла R_H и (вставка) холловской подвижности μ_H , рассчитанные для полированных (р) и травленых (е) образцов $\text{R}_{0.02}\text{Sm}_{0.98}\text{B}_6$ (R – Eu , Gd , Yb).

Обнаружено, что гальваномагнитные свойства включая коэффициент Холла, удельное сопротивление и холловская подвижность сильно зависят от способа подготовки поверхности в случае соединений с двухвалентной магнитной (Eu^{2+}) и немагнитной (Yb^{2+}) примесью рис. 1,2. Для них подвижность меняется примерно на порядок в низкотемпературном пределе от значений $1.12 \text{ см}^2/(\text{B}\cdot\text{с})$ до $18 \text{ см}^2/(\text{B}\cdot\text{с})$. Напротив, в случае трехвалентной примеси Gd^{3+} зависимости, полученные для травленых и полированных образцов,

практически совпадают и эффект влияния состояния поверхности пропадает. Кроме того, при легировании Gd^{3+} отношение сопротивления для травленой и полированной поверхности практически отсутствует и отличается от остальных представителей ряда $R_{0,02}Sm_{0,98}B_6$, демонстрируя уменьшение абсолютных значений сопротивления после травления. Отметим, что в случае Yb^{2+} холловская подвижность носителей заряда оказывается наименьшей, что позиционирует ион Yb^{2+} как примесь с наиболее сильным рассеянием носителей заряда, сильнее влияющую на поверхностные состояния, чем магнитные ионы Eu^{2+} и Gd^{3+} .

Полученные результаты указывают на необходимость дальнейшего изучения эффектов, вызванных изгибом зон под влиянием потенциала поверхности, а также возможной эволюции структуры спектра возбуждений ТКИ, обусловленной влиянием немагнитных и магнитных примесей.

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

Литература

1. M. Dzero et al., Phys. Rev. Lett. 104, 106408 (2010).
2. В. Глушкин и др., Письма в ЖЭТФ 116, 770 (2022).
3. M. Anisimov et al., Solid State Sciences 152, 107546 (2024)

К ВОПРОСУ О ПРЕДЕЛАХ ЛЕГИРОВАНИЯ АЛМАЗА И АЛМАЗОПОДОБНОГО НИТРИДА БОРА

Зибров И.П., Филоненко В.П., Баграмов Р.Х., Ляпин С.Г., Энкович П.В.

Институт физики высоких давлений РАН, Москва, г. Троицк

zibrov@hppi.troitsk.ru

Алмаз и кубический нитрид бора являются классическими сверхтвердыми материалами, имеющими максимальные показатели прочности кристаллической решетки. В связи с малыми размерами атомов и прочной ковалентной связью значимое легирование алмаза и нитрида бора возможно только элементами малого размера. Достигнутые на сегодня максимальные параметры ячеек допированных cBN и алмаза представлены в данной работе.

Исходными компонентами для синтеза высоколегированного нитрида бора являлись порошковые смеси рентгеноаморфного бора с

нитридом углерода стехиометрического состава C_3N_4 . Термобарическая обработка смесей проводилась в камерах высокого давления типа «тороид» при $P=7\text{-}8 \text{ ГПа}$ и температурах около 1500°C .

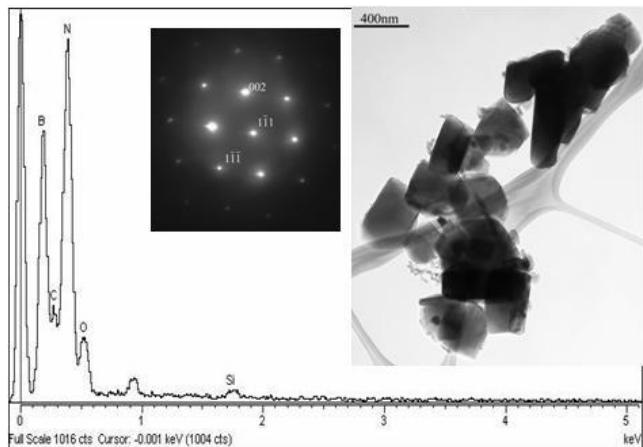


Рис. 1. Результаты ТЕМ анализа высоколегированного нитрида бора

Максимальные размеры алмазоподобной ячейки в кристаллах легированного сBN были получены из смесей бора и наносферической модификации C_3N_4 с высоким содержанием хемосорбированного кислорода. Детали уточнения структуры представлены в работе [1], а пример анализа кристаллов показан на рисунке 1. В узлах решетки сBN атомы азота и бора частично замещены атомами углерода (до 10%) и кислорода (до 5%). Предполагается, что рекордное увеличение ячейки (Рис. 2) связано с замещением кислородом атомов азота.

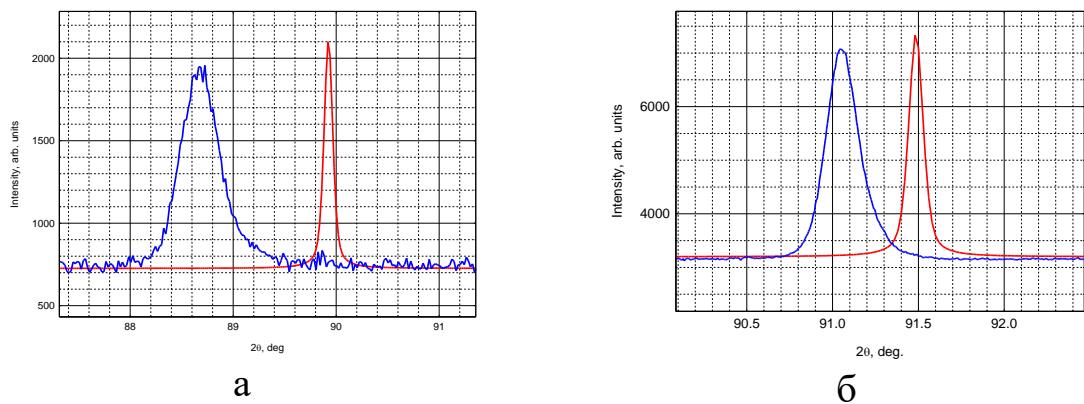


Рис. 2. Дифрактограммы образцов в области отражения (311) с максимальным параметром ячейки: а – BCNO, $a=3.65515(3) \text{ \AA}$ [1] (красный цвет – стандартный BN с $a=3.6153 \text{ \AA}$); б – борированный алмаз, $a=3.5800(3) \text{ \AA}$ (красный цвет – стандартный алмаз с $a=3.56699 \text{ \AA}$).

Единственным элементом, который может в большом количестве замещать атомы углерода в решетке алмаза, является бор. В работе [2] было показано, что параметры элементарной ячейки высокоборированных алмазов имеют две дискретные величины: около 3.570 Å для концентраций бора 1-1.5% и около 3.578 Å для концентраций 2-3%. Рекордный размер ячейки (Рис. 2) был получен при синтезе алмаза из смеси бора с газовой сажей после оптимизации состава смеси и режимов термобарического воздействия.

Таким образом, достигнуты рекордные параметры по увеличению размеров элементарной ячейки, которые для алмаза составили 0.36%, а для нитрида бора 1.1%, что, вероятно, связано с низкой энергией образования дефектов замещения Св, Сн и Он в сBN [3].

Работа выполнена в рамках программы Министерства науки и высшего образования РФ FFUW-2021-0003.

1. Filonenko V.P., Davydov V.A., Zibrov I.P. Diam. Relat. Mater. 2010, 19, 5, 541-544.
2. Zibrov I.P., Filonenko V.P. Crystals. 2018, 8, 297.
3. Orellana W. Phys. Rev. B. 2000, 62, 15, 10135-10141.

МАГНИТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И АНИЗОТРОПИЯ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ MnBi_2Te_4

Вальков В. В., Злотников А. О.

*Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения
Российской академии наук, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск
zlotn@iph.krasn.ru*

Существование ниже температуры Нееля $T_N = 24$ К антиферромагнитного (АФМ) порядка в топологическом изоляторе MnBi_2Te_4 [1, 2] определило повышенный интерес к этому слоистому ван-дер-ваальсовскому материалу, поскольку открылась возможность дополнительного воздействия на топологически защищенные поверхностные состояния.

Магнитное упорядочение в MnBi_2Te_4 соответствует АФМ А типа, при котором магнитные моменты ионов Mn^{2+} в пределах одного слоя образуют ферромагнитную структуру, тогда как в соседних плоскостях эти моменты ориентированы антипараллельно. По данным нейтронного рассеяния [3] в пределах одного слоя между ионами

марганца реализуется конкурирующее обменное взаимодействие. При этом реализация АФМ сверхобмена между ионами Mn через лиганды Te²⁻ подтверждается правилом Гуденафа-Канамори-Андерсона. Однако формирование ферромагнитного обменного взаимодействия в данном подходе не может быть объяснено. В работе [4] на основе первопринципных DFT расчетов было показано, что гибридизация p-состояний ионов Bi³⁺ с p-состояниями Te²⁻ может служить механизмом формирования ферромагнетизма.

Важная особенность магнитных свойств MnBi₂Te₄ обусловлена сильной анизотропией, в соответствие с которой магнитные моменты ориентированы перпендикулярно слоям. При этом поведение MnBi₂Te₄ в магнитном поле напоминает поведение изингоподобного АФМ. В работе [5] было показано, что это может быть связано с одноионной анизотропией (ОА), появляющейся только при учете спин-орбитального взаимодействия в ионах Te. Однако, единое описание как анизотропных свойств, так и механизма появления конкурирующих непрямых обменных связей между ионами Mn в MnBi₂Te₄ к настоящему времени отсутствует.

В данной работе показано, что ферромагнитная связь между магнитными моментами ионов марганца, находящимися в одном слое, может быть обусловлена кинематическим взаимодействием между фермионами Хаббарда, отражающими поведение сильно коррелированной подсистемы 3d-электронов ионов Mn²⁺. При этом АФМ обмен внутри слоя и между слоями ионов Mn²⁺ возникает по механизму Андерсона. В свою очередь, кулоновское взаимодействие, индуцирующее конфигурационное смешивание электронных состояний ионов марганца, совместно со спин-орбитальным взаимодействием, может приводить к сильной ОА.

При учете отмеченных факторов, в рамках метода эквивалентного спинового гамильтониана [6], соответствующего тригональной симметрии (группа C_{3d} (S₆)) системы, сформулирована эффективная модель с ОА для описания магнитной подсистемы MnBi₂Te₄. В спин-волновом приближении с привлечением атомного представления рассмотрена эволюция магнитного состояния MnBi₂Te₄ при изменении магнитного поля и температуры. Проанализированы особенности спин-флоп перехода в состояние «опрокинутых» подрешеток. Показано, что для описания парапроцесса в фазе «схлопнутых» подрешеток существенную роль играет тригональная компонента кристаллического поля.

Изучено влияние параметров ОА на скос подрешеток в поле, лежащем в плоскости ионов Mn. Определены обменные интегралы и константы анизотропии, для которых полученные результаты соответствуют экспериментальным данным для $MnBi_2Te_4$,

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда #23-22-10021, <https://rscf.ru/project/23-22-10021/> и Красноярского краевого фонда науки.

Литература

1. M.M. Otrakov, I.I. Klimovskikh, H. Bentmann et al., *Nature*, **576**, 416, **2019**
2. J. Li, Y. Li, Sh. Du et. al., *Sci. Adv.*, **5**, eaaw5685, **2019**
3. B. Li, J.-Q Yan, D.M. Pajerowski et al., *Phys. Rev. Lett.*, **124**, 167204, **2020**
4. J. Li, J.Y. Ni, X.Y. Li et al., *Phys. Rev. B*, **101**, 201408, **2020**
5. Y. Li, Z. Jiang, J. Li et al., *Phys. Rev. B*, **100**, 134438, **2019**
6. Альтшулер С.А., Козырев Б.М., Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп, Наука, М. (1972).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АНСАМБЛЯ ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ КОНТАКТОВ, СОДЕРЖАЩИХ МАЙОРАНОВСКИЕ ФЕРМИОНЫ, С ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНОЙ В ОДНОМОДОВОМ РЕЗОНАТОРЕ

Казак А. И.¹, Сеидов С. С.²
¹ – НИТУ МИСИС, ² – НИУ ВШЭ
archiem328@gmail.com

Рассмотрим множество джозефсоновских контактов находящихся в одномодовом оптическом резонаторе, в котором находится электромагнитная волна с частотой ω . Каждый джозефсоновский контакт имеет куперовскую пару, которая может туннелировать с одного берега на другой. Также, на обоих берегах джозефсоновского контакта присутствуют майорановские фермионы.

Говоря о джозефсоновской энергии, мы подразумеваем, что происходит туннелирование куперовских пар, майорановские фермионы в свою очередь, обеспечивают туннелирование только

одного электрона. Переход от туннелирования $2e$ к e изменяет периодичность энергии. [1]

Гамильтониан описываемой системы имеет вид:

$$H = \frac{\omega}{2}(p^2 + q^2) - 2pg \sum_i^N n_i + \frac{g^2}{2} \left(\sum_i^N n_i \right)^2 + \\ + \sum_i^N (2E_J(\sigma_x^i \otimes \tau_e^i) - 4E_M(\sigma_y^i \otimes \tau_x^i))$$

Здесь p – оператор импульса, q – оператор координаты, g – константа связи, n – оператор числа частиц, E_J – джозефсоновская энергия, E_M – майорановская энергия, $\sigma_{x,y}$ – матрицы Паули характеризующие куперовские пары, $\tau_{x,e}$ – матрицы Паули характеризующие майорановские фермионы, N – число джозефсоновских контактов.

Введение майорановских фермионов описываемых матрицами Паули 2×2 повысило степень свободы и теперь гамильтониан принадлежит к группе $SU(4)$. Это можно заметить, по последнему члену в гамильтониане – тензорные произведения операторов куперовских пар и майорановских фермионов представляют из себя матрицы 4×4 , которые принадлежат к группе $SU(4)$, то есть варианту спина, который находится в пространстве более высокой размерности.

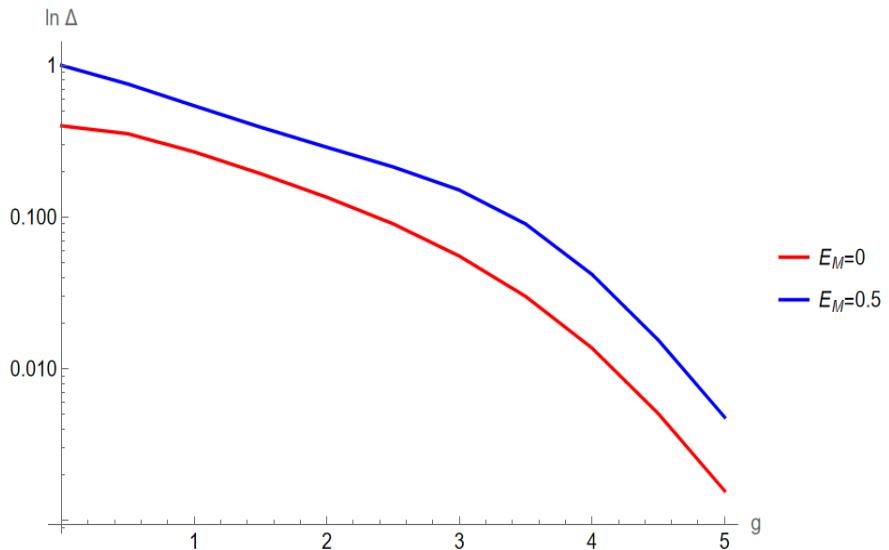


Рисунок 1 – Энергетические щели гамильтониана при разных значениях майорановской энергии. $E_J = 0.2$.

Известно, что рассматривая ансамбли двухуровневых систем взаимодействующих с электромагнитной волной в оптическом

одномовом резонаторе возникает фазовый переход первого рода, который характеризуется переходом в сверхизлучательную фазу. [2] Поэтому, закономерно, стоит рассмотреть влияние майорановских фермионов на энергетическую щель системы

Гамильтониан был диагонализован при $N=3$, получен спектр системы в зависимости от константы связи и при разных значениях майорановской энергии. Логарифмическое сравнение щелей изображено на рисунке 1.

Введение майорановских фермионов смещает точку, в которой должна закрываться щель. Закрытие щели, как упоминалось выше, будет говорить о том, что произошел переход в сверхизлучательную фазу. Таким образом, можно утверждать, что майорановские фермионы находясь в системе ансамблей джозефсоновских действительно вносят вклад в переход системы в сверхизлучательную фазу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" (Стратегический проект "Квантовый интернет").

Литература

1. Van Heck, B., et al. "Coulomb stability of the 4π -periodic Josephson effect of Majorana fermions." *Physical Review B* 84.18 (2011): 180502.
2. Mukhin S. I., Gnezdilov N. V. First-order dipolar phase transition in the Dicke model with infinitely coordinated frustrating interaction //*Physical Review A*. – 2018. – Т. 97. – №. 5. – С. 053809.

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ СПЛАВОВ AL-CU-NI ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Камаева Л. В.¹, Циок Е. Н.¹, Щелкачев Н. М.², Бражкин В. В.²

¹ УдмФИЦ УрО РАН

²ИФВД РАН

lara_kam@udman.ru

Сплавы системы Al-Cu-Ni в области, богатой Al, обладают хорошими литейными свойствами и при определенных соотношениях и морфологии фазовых составляющих могут сочетать высокую

твердость и пластичность. Система Al-Cu-Ni не образует равновесных квазикристаллических фаз, но сплавы этой системы при концентрации 30 ат.% Cu и выше проявляют эффект памяти формы и рассматриваются как альтернатива сплавам Ti-Ni. Воздействие давлением при затвердевании сплавов на основе Al часто приводит к образованию новых интерметалидных фаз, богатых Al, которые выступают в качестве фаз-упрочнителей, а также может привести к образованию квазикристаллической фазы. Формирование и рост интерметалидов и квазикристаллов определяется не только кинетическими факторами, но и исходной структурой расплавов перед началом кристаллизации. Поэтому в данной работе проведены комплексные исследования структуры и свойств сплавов Al-Cu-Ni в жидком и твердом состоянии, в т.ч. полученном при затвердевании в условиях высоких давлений.

Для сплавов Al-Cu-Ni были подробно изучены температурные и концентрационные зависимости кинематической вязкости в области концентраций от 17.5 до 40 ат.% Cu при 10 и 20 ат.% Ni, а также в области от 5 до 30 ат.% Ni при 30 ат.% Cu. На изотермах вязкости и характеристиках вязкого течения обнаружены минимумы и максимумы. Минимум вязкости при 10 ат.% Ni и при 21 ат.% Cu соответствует инвариантному превращению $L+Al_3Ni_2 \rightarrow L+\beta$. Минимум вязкости при 35 ат.% Cu и 10 ат.% Ni, а также максимумы вязкости при 20 ат.% Ni и 25, 37 ат.% Cu по данным молекулярно-динамического моделирования связаны с ослаблением или усилением химического взаимодействия между атомами Al, Cu и Ni в различных концентрационных интервалах. Влияние изменений концентрации никеля при постоянной концентрации меди также оказывает неоднозначное влияние на вязкость расплавов Al-Cu-Ni.

Методом термического анализа определены температуры фазовых превращений исследованных сплавов, а также построены соответствующие концентрационные сечения диаграммы состояния. Анализ данных термического анализа позволил точно определить значения температур ликвидус исследованных сплавов и фазовый состав различных областей диаграммы состояния, в т.ч. и двухфазной области, ограниченной линией ликвидус. Также данный метод позволил определить концентрационные зависимости переохлаждения при кристаллизации расплавов в тиглях Al_2O_3 в условиях охлаждения от различных температур со скоростями 20, 50, 100°C/мин. Сопоставление концентрационных зависимостей вязкости и переохлаждения расплавов Al-Cu-Ni между собой, а также с видом

концентрационных срезов тройной диаграммы состояния позволило установить выраженное влияние химического взаимодействия в расплаве на условия образования твердых фаз на первых этапах кристаллизации при нормальном давлении.

Проведенное молекулярное динамическое моделирование расплавов Al-Cu-Ni при давлении 10 ГПа показало, что концентрации, при которых происходят значимые изменения параметров химического ближнего порядка, соответствуют концентрациям, при которых атомы Cu или Ni входят в первую координационную сферу вокруг атомов выбранного сорта (Cu, Ni, Al). При увеличении давления до 10 ГПа эти концентрации сдвигаются. Такое изменение соответствует наблюдаемым в эксперименте изменениям концентраций инвариантных равновесий. Увеличение давления до 5 ГПа смещает область инвариантных равновесий в область меньших концентраций Cu и Ni. Показано, что полученная при высоком давлении структура сплавов стабильна до температур ~ 500 $^{\circ}$ С и характеризуется большими значениями микротвердости по сравнению со структурами, полученными в условии нормального давления. Особенна значима разница в значениях микротвердости для сплавов богатых Al затвердевающих при нормальном и высоком давлении.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-00370, <https://rscf.ru/project/24-22-00370/>

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА И ДИФФУЗИИ В ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ 5СВ

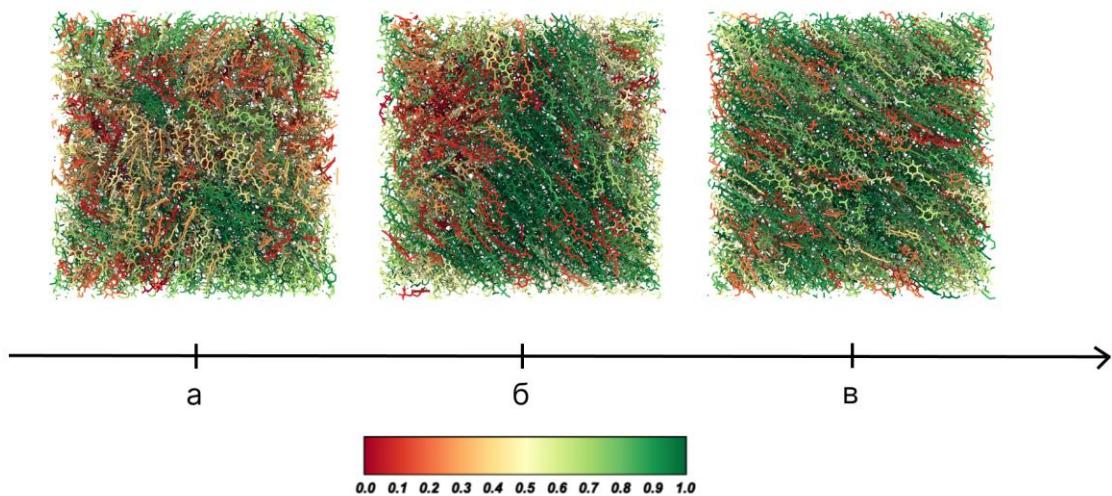
Касапенко Н. А.^{1, 2}, Кондратюк Н. Д.^{1, 2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединенный институт высоких температур РАН
kasapenko.na@phystech.edu.

Для моделирования диффузии светочувствительной молекулы-мотора в жидким кристалле [1] была поставлена задача получения нематической фазы жидкого кристалла. Метод молекулярной динамики активно используется в моделировании жидким кристаллов [2, 3, 4] и позволяет наблюдать фазовые переходы. В данной работе в методе молекулярной динамики с использованием потенциала GAFF рассматривается система, состоящая из 1100 молекул жидкого

криスタлла 5CB (4-пентил-4'-цианобифенил). При температуре 300 К наблюдается фазовый переход из изотропной фазы в нематическую. Для определения фазы рассчитывался параметр ориентационного порядка s . На рисунке ниже представлена последовательность фаз в разные моменты времени в процессе моделирования системы в NPT ансамбле при температуре 300 К.



Раскраска производится по величине модуля проекции единичного вектора главной оси молекулы на ось директора. Ось директора задает преимущественное направление главных осей молекул. Нулевая проекция (бордовый цвет) соответствует перпендикулярному взаимному расположению главной оси молекулы и директора, в то время как единичная (темно-зеленый цвет) проекция соответствует параллельному расположению главной оси молекулы и директора. На рис. а изображена система в изотропной фазе в начальный момент времени ($t = 0$ мкс, $s = 0.11$), на рис. б изображена система в промежуточном состоянии ($t = 0.52$ мкс, $s = 0.32$), на рис. в изображена система в нематической фазе в конечном состоянии ($t = 1.46$ мкс, $s = 0.52$). Наблюдается упорядочение системы с течением времени в направлении директора.

При дальнейшем моделировании в NVT ансамбле на протяжении 1.8 мкс для нематической фазы рассчитываются коэффициенты диффузии вдоль директора ($D_{||}$) и в плоскости, перпендикулярной директору (D_{\perp}). Рассматривается зависимость плотности, энергии системы и параметра порядка от времени при фазовом переходе. Полученные величины согласуются с экспериментальными работами [5, 6, 7, 8]. Также рассматривается температурная зависимость упомянутых выше величин (при $T = 290$ К и $T = 310$ К).

Работа проводится при поддержке программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075-15-2024-200 от 06.02.2024).

Литература

1. Orlova T. et al., *Nat. Nanotechnol.*, **13**, 4, **2018**
2. Vilhena J. G. et al., *Chem. Theory Comput.*, **17**, 7, **2021**
3. Prampolini G. et al., *Phys. Chem. Lett.*, **13**, 1, **2021**
4. Tiberio G. et al., *Chem. Phys. Chem.*, **10**, 1, **2009**
5. Deschamps J. et al., *Phys. Chem. B.*, **112**, 13, **2008**
5. Zgura I. et al., *Chryst. Res. Technol.*, **44**, 8, **2009**
7. Magnuson M. et al., *Liq. Cryst.*, **19**, 6, **1995**
8. Roushdy M. et al., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **457**, 1, **2006**

КВАНТОВАЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ НА ОСНОВЕ ГЕЛИКОИДАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

Качоровский В. Ю.

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

kachor.valentin@gmail.com

Интерферометры на основе систем с малым количеством квантовых каналов находятся в фокусе исследования в последние десятилетия, в первую очередь, из-за возросшего интереса к квантовым вычислениям. Многообещающая возможность для дальнейшего развития в этом направлении связана с открытием 2D топологических изоляторов (ТИ), которые не проводят в объёме, но содержат 1D проводящие геликоидальные краевые состояния (ГКС). Электроны, распространяющиеся в ГКС в противоположных направлениях, имеют также и противоположные спины. Транспорт через ГКС топологически защищён, поскольку рассеяние назад на обычных немагнитных примесях запрещено. ТИ с двумя контактами представляет собой простейшую реализацию квантового электронного интерферометра на основе ГКС. Принципиальное отличие от интерферометра на основе обычных (не геликоидальных) 1D каналов состоит в том, что интерференция в крае ТИ возникает только при наличии спин-флип процессов. Эти процессы появляются при наличии в системе магнитного дефекта, либо за счёт туннельной связи ГКС с заряженным островком, а также в периодических массивах ГКС, которые

реализованы в недавних экспериментах. Поэтому, наблюдение интерференционных эффектов позволяет извлечь информацию о возможных процессах разрушения топологической защиты.

В докладе обсуждается влияние интерференционных эффектов на транспорт и шум в системах на основе ГКС. Показано, что зависимость кондактанса G и фактора Фано F от магнитного потока ϕ , существенно более универсальна, чем в обычных интерферометрах. Как G так и F имеют резонансную зависимость от ϕ , причём резонансы имеют нетривиальную форму и выживают вплоть до достаточно высоких температур. Предложено описание системы на языке ансамбля управляемых кубитов, которые можно использовать для квантовых вычислений. Также показано, что в периодических массивах ГКС интерференция приводит к возникновению зонной структуры, которой можно управлять с помощью ϕ , например, создавая дираковские точки или (при наличии дефектов) локализованные кубиты.

Наиболее интересные эффекты возникают при учёте ее-взаимодействия. В частности, взаимодействие может привести к возникновению нескольких фаз и мультикритическому поведению периодических массивов ГКС. Ещё более интересен механизм рассеяния назад, обусловленный так называемыми «флуктуациями нулевой моды» в заряженном островке, существующем около ГКС. Без взаимодействия, различные процессы, которые могли бы привести к рассеянию назад, деструктивно интерфеcируют и их вклад сокращается. Флуктуации нулевой моды приводят к подавлению деструктивной интерференции и возникновению рассеяния назад, причём существенную играют роль два разных явления: термодинамическое усреднение по флуктуациям тока нулевой моды и сбой фазы, вызванный взаимодействием этих флуктуаций с окружением. Темп сбоя фазы весьма нетривиально ведёт себя с силой ее взаимодействия и при не слишком большой силе взаимодействия насыщается и перестаёт зависеть от силы взаимодействия. В отличие от рассмотренных ранее механизмов нарушения топологической защиты ее-взаимодействием, данный механизм не связан с неупругими процессами и имеет слабую зависимость от температуры в хорошем согласии с экспериментом.

Работа выполнена при поддержке РНФ № 20-12-00147-П.

АДИАБАТИЧЕСКИЕ И ИЗОТЕРМИЧЕСКИЕ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ПЛЕНКАХ И МИКРОПРОВОДАХ Gd

Кашин С. Н., Моргунов Р. Б.

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и

медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия

SN.Kashin@yandex.ru

Магнитокалорические эффекты (МКЭ) в твердых телах давно привлекали внимание своей эффективностью, отсутствием вредных хладагентов и простотой конструкции холодильных машин на их основе [1]. Дальнейшее развитие это направление получило при рассмотрении других воздействий немагнитной природы, циклическое приложение которых позволяет получить охлаждающий цикл. Одним из перспективных направлений является охлаждение твердых тел с помощью механической деформации [2]. Использование немагнитных воздействий в магнито-охлаждающих устройствах привело к созданию гибридных холодильных машин, в которых магнитный термодинамический цикл существенно приближается к циклу Карно при синхронизированной работе магнито-охлаждающей системы совместно с элементом Пельтье или механическими деформациями рабочего тела [3].

В качестве рабочего тела охлаждающих машин наиболее актуальным является гадолиний и его сплавы, поскольку их температура Кюри близка к комнатной температуре и изменение температуры рабочего тела может достигать 20-30 К [3]. Тонкие пленки в составе гетероструктур находят свое применение при локальном охлаждении сенсоров, в то время как микропровода Gd являются отличными претендентами на роль рабочего тела магнитного холодильника, поскольку обладают значительной площадью удельной поверхности. Управлять величиной магнитокалорического эффекта можно как с помощью изменения химического и фазового состава образца, так и путем создания внутренних напряжений. Кроме этого, значительная анизотропия намагниченности в пленках и микропроводах, возникающая из-за текстурирования материала, может быть использована для совершенствования конструкции магнитных холодильных машин.

В работе проведен сравнительный анализ температурной и полевой зависимостей намагниченности пленок и микропроводов Gd,

а также анализ изотермических и адиабатических изменений магнитной части энтропии и теплоемкости при температурах, близких к температуре Кюри. Было обнаружено, что магнитокалорический эффект в микропроводах проявляет два пика при 290 К и 320 К на температурной зависимости магнитной части энтропии, в отличие от единственного пика в пленках. В пленках и микропроводах максимум энтропии при \sim 290 К зависит от магнитного поля, одинаково смещаясь в пленках и микропроводах с увеличением поля. В микропроводах второй максимум при \sim 320 К не меняет своего положения при увеличении поля до 9 Т, но его амплитуда линейно возрастает с ростом поля. Этот максимум обусловлен спин-переориентационным переходом в фазе с повышенной температурой Кюри.

Работа выполнена в рамках тематической карты Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии РАН 124013100858-3.

Литература

1. J.Y. Lawa, L.M. Moreno-Ramírez, A. Díaz-García, V. Franco. *Journal of Applied Physics*, **133**, 4, **2023**.
2. L. Mañosa, A. Planes. *Applied Physics Letters*, **116**, 5, **2020**.
3. V.K. Pecharsky, K.A. Gschneidner, A.O. Tsokol. *Rep. Prog. Phys.*, **68**, 1479, **2005**.

СРАВНЕНИЕ СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЖИДКИХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ЭФИРОВ

Кашурин О. В.^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединенный институт высоких температур РАН
kashurin.ov@phystech.edu

В данной работе мы проводим сравнение распространенных межатомных потенциалов GAFF, OPLS-AA/CM1A, CHARMM36 и COMPASS с целью найти наилучший потенциал для качественного моделирования жидких ион-селективных барьеров на основе простых эфиров. В качестве основного вещества для моделирования используется дизопропиловый эфир (DIPE). С использованием

выбранных потенциалов проводятся расчеты плотности и вязкости DIPE. Также, с использованием CHARMM36 и COMPASS мы проводим оценку взаимной растворимости воды и DIPE, а также коэффициентов распределения этанола в растворе воды и DIPE.

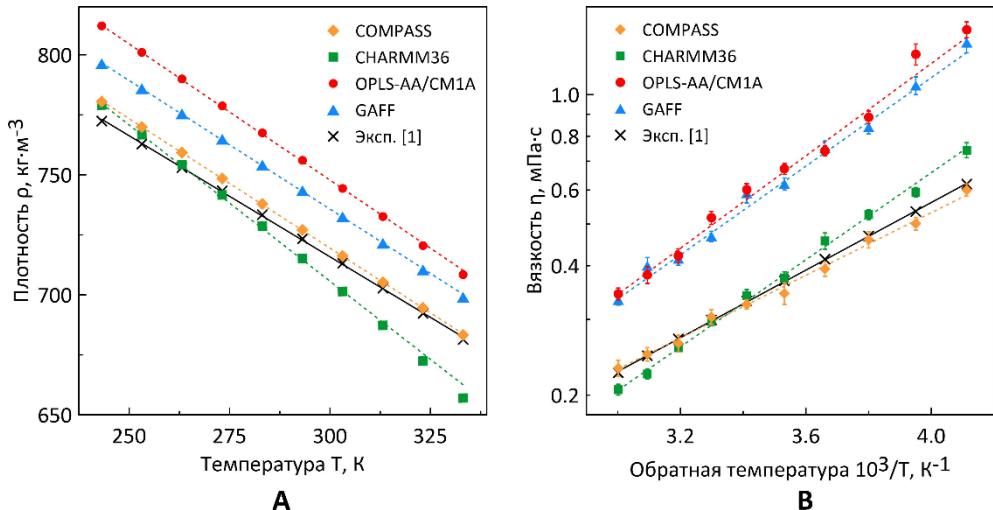


Рис. 1. Температурные зависимости плотности (А) и вязкости (Б) дизизопропилового эфира, рассчитанные с использованием различных потенциалов

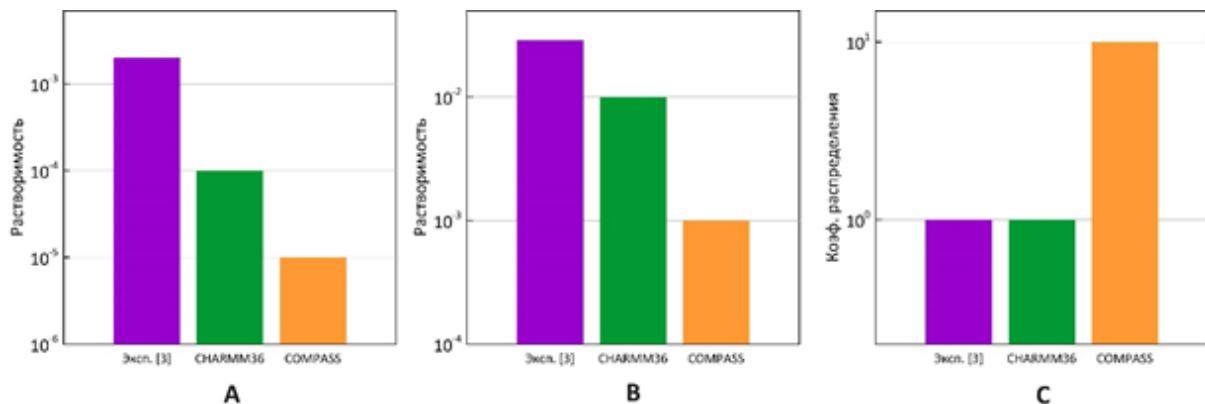


Рис. 2. Оценка (А) растворимости DIPE в воде, (Б) растворимости воды в DIPE, (С) коэффициентов распределения этанола в растворе воды и DIPE

Вязкость рассчитывалась методом Грина-Кубо. Расчеты плотности и коэффициентов вязкости DIPE проведены в диапазоне температур 243-333 К и давлении 0.1 МПа. Результаты приведены на рис. 1. GAFF и OPLS-AA/CM1A дают сильное отклонение для плотности и вязкости. CHARMM36 и COMPASS обеспечивают хорошую сходимость значений вязкости с экспериментом, давая

отклонение не больше 10 % при 273-333 К. Предварительные результаты по плотности и вязкости опубликованы в [2].

С использованием CHARMM36 и COMPASS произведена оценка по порядку величины взаимной растворимости воды и DIPE, а также коэффициентов распределения этанола в растворе воды и DIPE. Результаты оценки термодинамических свойств приведены на рис. 2.

При сравнении CHARMM36 и COMPASS можно заключить, что CHARMM36 воспроизводит термодинамические свойства раствора дизопропиля с водой значительно лучше, чем COMPASS. В связи с этим CHARMM36 можно назвать наилучшим среди рассмотренных потенциалом для качественного моделирования ион-селективных барьеров на основе простых эфиров.

Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075-15-2024-200 от 06.02.2024).

Литература

1. Meng X. et. al., J. Chem. Eng., **54**, 2353, **2009**
2. Kashurin O. et. al., Russ. J. Phys. Chem. A., **97**(6), 1183, **2023**
3. Arce A. et. al., J. Chem. Eng., **47**, 529, 2002

ИЗОТЕРМИЧЕСКОЕ ИЗМЕРЕНИЕ МАГНИТНОЙ ЧАСТИ ЭНТРОПИИ ДВУХФАЗНЫХ МИКРОПРОВОДОВ PrDyFeCoB

Дворецкая Е.В., Колмаков А.О., Моргунов Р.Б.
ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН
ao.kolmakov@gmail.com

Магнитокалорический эффект (МКЭ) в перспективе дает простой способ достижения экологически чистого энергосберегающего охлаждения. МКЭ заключается в том, что при помещении образца в магнитное поле в нем может происходить фазовый переход, изменяющий упорядоченность магнитных моментов и соответствующую часть магнитной энтропии [1].

В работе для вычисления магнитной части энтропии нами были получены полевые зависимости намагниченности в изотермическом режиме, когда поле увеличивалось достаточно медленно (33 Ое/min),

чтобы образец находился в термическом равновесии с камерой магнетометра и неизменял свою температуру. Из обширной серии записанных нами изотермических кривых на рис.1а приведены несколько примеров при разных температурах.

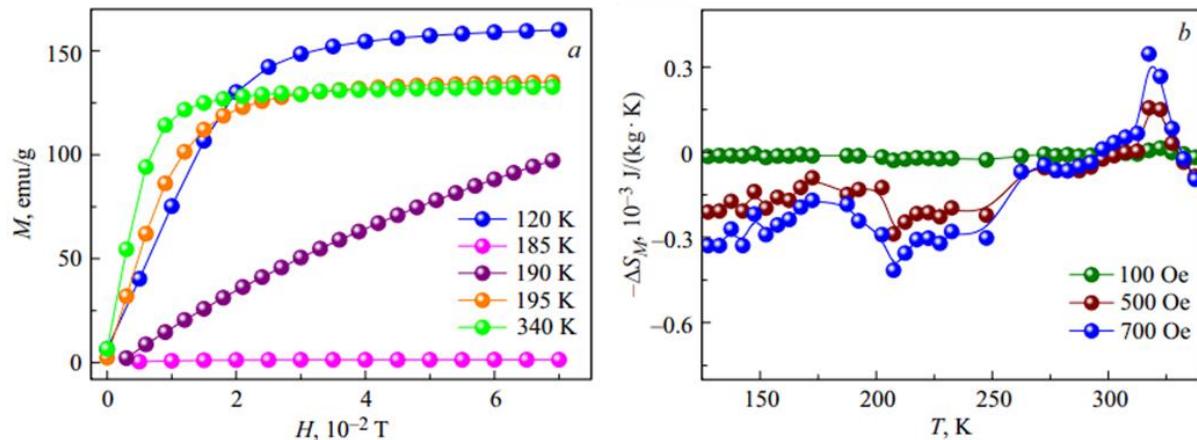


Рис.1. (а) изотермические зависимости намагниченности микропровода в диапазоне температур 120–300 К. (б) температурная зависимость изменения магнитной части энтропии.

Основой для расчета изменения полной энтропии является уравнение Максвелла, связывающее изменения энтропии и магнитного момента.

Из рис.1б видно, что в области 200 – 250 К имеет место отрицательный МКЭ, в то время как в области 300 – 340 К наблюдается положительный МКЭ. Полученные данные позволяют рассчитать основные магнитокалорические параметры микропроводов для положительного МКЭ при 700 Ое: максимальное изменение магнитной части энтропии $-\Delta S_m \sim 0.35$ мДж/кг · К, и относительная мощность охлаждения $RCP = 0.007$ Дж/г. Для отрицательного МКЭ, соответствующего минимуму на рис. 1б, получены следующие параметры: $-\Delta S_m \sim -0.4$ мДж/кг · К, $RCP \sim 0.04$ Дж/г.

Хотя полученные значения не являются рекордными и не могут конкурировать с максимальными значениями, полученными в литературе для сплавов Gd, они вполне приемлемы для технических применений.

Работа выполнена при поддержке программы ФИЦ «Центр проблем химической физики и медицинской химии РАН» 124013100858-3.

Литература

1. Ch. Hai-Ying et al. Chin. Phys. Lett., **28**, 7, 2011.

ПУСТЫЕ НЕ ЗНАЧИТ БЕСПОЛЕЗНЫЕ: ЗАЧЕМ НУЖНЫ S-СОСТОЯНИЯ РТУТИ ПРИ ОПИСАНИИ МАГНЕТИЗМА В HgMnO₃

Комлева Е. В.¹, Мякотников Д. А.², Стрельцов С. В.¹

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

²*Уральский Федеральный Университет им. первого Президента*

России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург

komleva.evg95@gmail.com

Согласно экспериментальным исследованиям недавно синтезированная под давлением перовскитная фаза HgMnO₃ обладает необычайно низкой в сравнении с другими мanganитами температурой Нееля порядка 60 К [1]. Благодаря первопринципным расчётом электронной структуры и магнитных свойств данного соединения было установлено, что существует значительный ферромагнитный вклад в обменное взаимодействие, влияющий на магнитные свойства, в частности, подавляющий температуру магнитного перехода. Этот вклад обусловлен непрямым обменным взаимодействием через пустые 6s-состояния ртути, расположенные в относительной близости уровня Ферми. Данный эффект может быть важен и для других соединений переходных металлов, имеющих пустые s-состояния около уровня Ферми.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №23-42-00069.

Литература

1. B. Zhou et al., *Inorganic Chemistry* **59**, 3887, 2020.

ОБРАЗОВАНИЕ NV ДЕФЕКТОВ В НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ НРНТ АЛМАЗАХ

Коновалова А. В., Игнатенко О. В., Ткаченко В. В., Паршутич С. Ф.
ГО «НПЦ НАН Беларусь по материаловедению» ул. П. Бровки 19,
Минск, РБ 220072
konovalovaalex@gmail.com

Возможность использования синтетического алмаза в качестве материала электронной техники, главным образом, связана с

возможностью управлять примесно-дефектной структурой кристаллов.

В ходе эксперимента было исследовано 6 монокристаллов алмаза, синтезированных методом НРНТ в области термодинамической стабильности алмаза путем постепенной перекристаллизации углерода, растворенного в расплавленном металле. Синтез осуществлялся в течение 85 часов в системе роста Fe-Ni-C. В результате были получены желтые алмазы типа Ia+b (рисунок 1а) с различными концентрациями основных азотных дефектов (рисунок 1б и 1в).

Облучались алмазы кристаллы ускоренными электронами с энергией 4 МэВ. Кристаллы располагались перпендикулярно пучку электронов, набранная доза составила $4 \cdot 10^{17}$ эл/см². В результате образцы приобрели темно-зеленый цвет (рисунок 2а). Для получения NV-центров алмазы отжигались в безвоздушной атмосфере при температуре более 900 °С в течение нескольких часов, в результате чего приобрели насыщенный красный цвет (рисунок 2б).

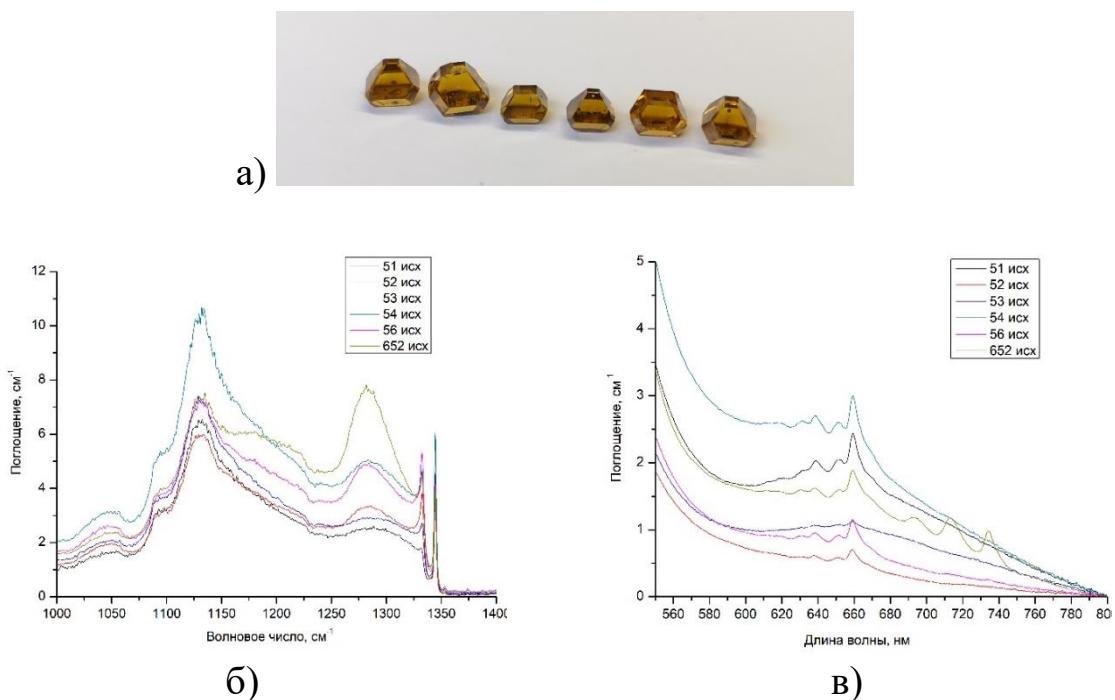


Рисунок 1. Фото синтезированных в системе Fe-Ni-C алмазов (а), а также спектры поглощения в ИК (б) и видимом (в) диапазонах

Для всех образцов отмечалось увеличение концентрации основных азотных дефектов (С-, А- и N⁺-дефекты) и степень кристаллографических напряжений (μ_{1130}/μ_{1344}) при облучении ускоренными электронами.

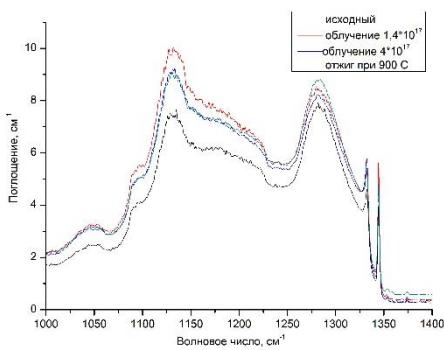


а)

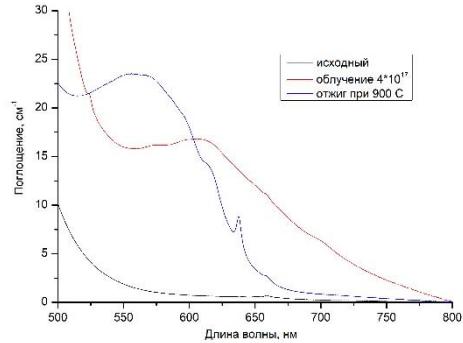


б)

Рисунок 2. Фото облученных электронами алмазов (а) и отожженных при 900 °С в течение 2 часов (б)



а)



б)

Рисунок 3. Спектры поглощения алмаза в ИК (а) и видимом (б) диапазонах на различных стадиях обработки

При последующем отжиге интенсивности линий поглощения дефектов уменьшались практически до исходных значений (рисунок 3а), в видимом диапазоне регистрировался дефект (NV)⁻ в виде ЭКС с БФЛ 637,2 нм (рисунок 3б).

РЕЛАКСАЦИОННАЯ ДИНАМИКА ТВЕРДОГО РАСТВОРА МАГНОНИОБАТА-СКАНДОНИОБАТА СВИНЦА

Королева Е. Ю.¹, Молоков А.Ю.¹, Вакуленко А.Ф.², Вахрушев С.Б.¹

¹ФТИ им. А.Ф.Иоффе

²СПбПУ Петра Великого

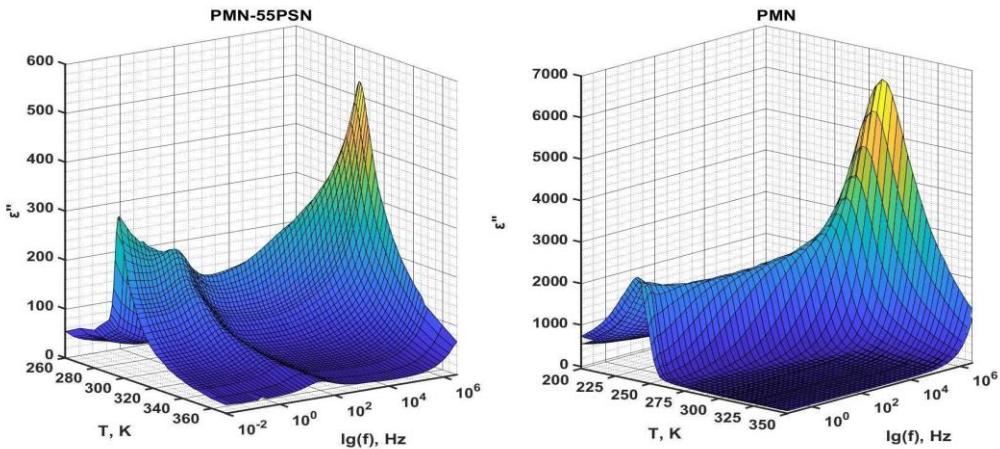
e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru

Сегнетоэлектрики - релаксоры интересны как с прикладной (для создания преобразователей/актиоаторов), так и с фундаментальной точек зрения. Ключевым моментом в физике релаксоров является химическое упорядочение в катионных подрешетках, которое сильно влияет на их свойства. В модельном релаксоре магнониобате свинца

$\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ (PMN) не удается получить полный химический порядок в В-позиции. С другой стороны, в скандониобате свинца $\text{PbSc}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ (PSN) может быть достигнута высокая степень химического порядка. В твердых растворах PMN-PSN можно получить различную степень химического порядка, причем увеличение степени химического упорядочения приводит к появлению «нормального» сегнетоэлектрического поведения. Основной целью нашей работы было изучение низкочастотной динамики монокристалла 0,45PMN-0,55PSN и выявление физических процессов, ответственных за диэлектрические свойства этого материала в температурном диапазоне максимума диэлектрического отклика.

Диэлектрические измерения проводились на диэлектрическом спектрометре Novocontrol BDS80. Диапазон измерительных частот 0,01 Гц – 3 МГц. Температурный диапазон 260 – 370 К. Эволюция кристаллической структуры отслеживалась с помощью монокристаллической рентгеновской дифракции на дифрактометре SuperNova.

Температурная эволюция спектров диэлектрических потерь 0,45PMN-0,55PSN представлена в виде 3D плотов вместе со спектром PMN для сравнения. Хорошо видно сходство формы этих двух максимумов диэлектрических потерь («седлообразное» поведение), однако, четко идентифицируются два новых релаксационных процесса.



3D графики $\epsilon''(f, T)$ 0,45PMN-0,55PSN и PMN.

Для анализа релаксационных спектров мы использовали модельную функцию, включающую несколько функций Коула-Коула для описания релаксационных процессов и вклад высокочастотной диэлектрической проницаемости. В результате обработки нам удалось идентифицировать 4 релаксационных процесса и проследить за температурной эволюцией их параметров. Нам удалось выявить связь

между низкочастотной динамикой диэлектрического отклика и фазовым переходом в сегнетоэлектрическую фазу в PMN-PSN. Установлено, что в диэлектрическом спектре твердого раствора 0,45PMN-0,55PSN присутствуют как характерные для PMN релаксационные процессы, связанные с динамикой полярных нанообластей, так и процесс, связанный с фазовым переходом в сегнетоэлектрическую фазу. При охлаждении наблюдается резкий рост сегнетоэлектрической релаксационной моды вблизи 306 К, однако фазовый переход в сегнетоэлектрическую фазу происходит только при 295 К из-за появления антиферродисторсионного параметра порядка, о чем свидетельствуют возникающие сверхструктурные рефлексы М-типа.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ №22-12-00328, <https://rscf.ru/en/project/22-12-00328/>.

ОДИНОЧНЫЕ НАНОАЛМАЗЫ В МАССИВНОМ КВАРЦЕВОМ СТЕКЛЕ

Короткова М.А.¹, Ефимченко В.С.¹, Терещенко А.Н.¹, Ходос И.И.²

¹*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка*

²*Институт проблем технологий микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук, г. Черноголовка*
korotkova@issp.ac.ru

Для использования детонационных наноалмазов (ДНА) в области квантовых приложений необходимо решить проблемы их агрегации [1] и наличия у них оболочки из sp^2 -углерода [2], подавляющей оптическую активность отрицательно заряженных центров окраски азот-вакансия (NV^- центров). Возможным решением первой проблемы может быть включение одиночных ДНА в твердое вещество, прозрачное в оптическом диапазоне.

Целью настоящей работы было получение плотного массивного кварцевого стекла с одиночными ДНА, однородно распределенными по его объему, и проверка сохранения фотолюминесценции NV^- центров в ДНА.

Исходные аэрогели на основе SiO_2 , содержащие 1 и 6 вес.% ДНА, были получены в ИФАВ РАН методом сверхкритической сушки [3]. Для удаления воды и гидроксильных групп аэрогели были отожжены в

атмосфере аргона при атмосферном давлении и температуре 550 °C в течение 4 часов, а затем уплотнены при давлении 7.5 ГПа и температуре 250 °C в плотные массивные диски SiO₂/C диаметром ~ 3 мм и толщиной ~ 1 мм для 1 вес.% ДНК и – диаметром ~ 5 мм и толщиной ~ 1.5 мм для 6 вес.% ДНК. Диск SiO₂/C (1 вес.% ДНК) разрушился сразу после извлечения из ячейки высокого давления, а диск SiO₂/C (6 вес.% ДНК) расслоился на три диска толщиной ~ 0.6/0.6/0.3 мм в течение нескольких часов.

Рентгеноструктурный анализ полученных плотных образцов SiO₂/C при атмосферном давлении и комнатной температуре показал, что после обработки при высоком давлении и температуре матрица из SiO₂ перешла в более плотное аморфное состояние. В спектрах комбинационного рассеяния света плотными образцами SiO₂/C при комнатной температуре наблюдалась только люминесценция от матрицы из кварцевого стекла и нейтральных NV⁰ центров в ДНК. ПЭМ-изображения (Рис.1. – слева) обоих образцов SiO₂/C выглядели практически одинаково и свидетельствовали об однородном распределении одиночных ДНК в твердой матрице SiO₂. Спектр фотолюминесценции (Рис.1. – справа), измеренный для SiO₂/C (1 вес.% ДНК) при температуре 27 °C, показал наличие слабого пика на длине волны 646 нм. Интенсивность этого пика значительно увеличилась при охлаждении образца до температуры –258 °C. Длина волны и изменение интенсивности пика при охлаждении соответствуют NV[–] центру в ДНК.

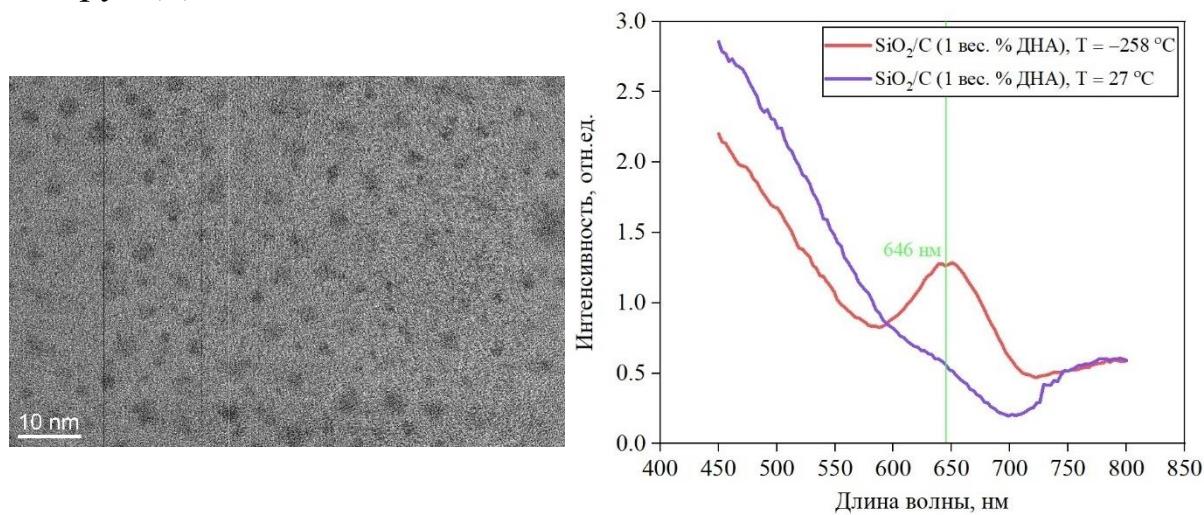


Рис.1. Слева: ПЭМ-изображение ДНК в матрице аморфного SiO₂ для образца SiO₂/C (6 вес.% ДНК). Справа: Спектры фотолюминесценции для образца SiO₂/C (1 вес.% ДНК), измеренные при температурах –258 °C и 27 °C.

Таким образом, уплотнение аэрогеля при давлении 7.5 ГПа и температуре 250 °С превращает его в плотное, химически инертное массивное кварцевое стекло с одиночными ДНА, однородно распределенными по его объему, и сохранившими люминесцентные свойства NV⁻ центров в ДНА.

Работа поддержана грантом РНФ № 23-22-00361.

Литература

1. J. A. Hammons et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, **12**, 22, **2021**.
2. D.G. Bogdanov et al., *RSC Adv.*, **11**, 21, **2021**.
3. S. A. Lermontov et al., *Russ. J. Inorg. Chem.*, **65**, 255, **2020**.

МЯГКАЯ МАТЕРИЯ-НА-ЧИПЕ

Корсакова С. А.¹, Кушнир И. А.¹, Быстров Д. А.¹, Грицаева А. В.¹,
Копылова А. А.¹ и Юрченко С. О.¹

¹*МГТУ им. Н. Э. Баумана, НОЦ «Мягкая материя и физика флюидов»*
korsakova.sa@bmstu.ru

Мягкая материя – термин, который включает в себя большую группу разнообразных материалов, начиная от жидкостей, коллоидных систем, полимеров, заканчивая различными системами биологической природы: культурами живых клеток или бактерий, биологическими полимерами. Микрофлюидика – наука о поведении малых объемов жидкости в микроканалах, которая находится на стыке физики, химии, гидравлики, инженерии и биологии. Микрофлюидные устройства являются удобным и эффективным инструментом для создания систем синтеза [1], транспорта [2], сортировки [3], управления коллективной динамикой и динамикой отдельных частиц в мягкой материи [4].

Сочетание преимуществ микрофлюидики и свойств мягкой материи позволяет создавать устройства, отвечающие задачам современной науки, в том числе биологии и персонализированной медицины. В настоящей работе представлены результаты исследований в области создания устройств орган-на-чипе для ускоренного испытания лекарств и персонализированной медицины. На примере создания системы мозг-на-чипе (двухбарьерной микрофизиологической системы Рисунок 1) продемонстрированы

особенности проектирования и моделирования таких устройств, а также показано, как междисциплинарный подход и знания различных физических подходов и принципов, в том числе о свойствах мягкой материи, позволяют решить сложные задачи на стыке науки и технологий для передовой медицины будущего.

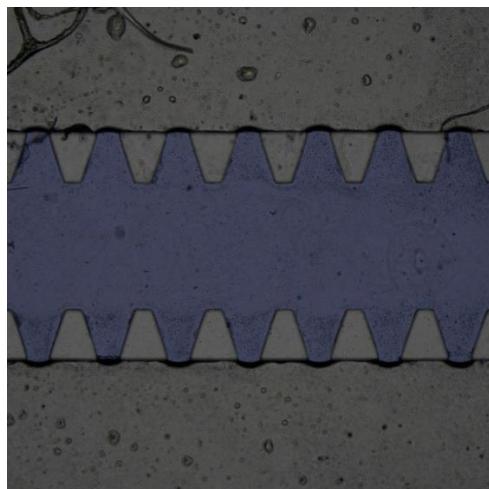


Рисунок 1. Гидрогель в канале микроФлюидного чипа «мозг-на-чипе»

Литература

1. Li W , Zhang L , Ge X , Xu B , Zhang W , Qu L , Choi CH , Xu J , Zhang A , Lee H , Weitz DA . Microfluidic fabrication of microparticles for biomedical applications. *Chem Soc Rev.* 2018 Jul 30;47(15):5646-5683. doi: 10.1039/c7cs00263g.
2. Ryan DP, Chen Y, Nguyen P, Goodwin PM, Carey JW, Kang Q, Werner JH, Viswanathan HS. 3D particle transport in multichannel microfluidic networks with rough surfaces. *Sci Rep.* 2020 Aug 14;10(1):13848. doi: 10.1038/s41598-020-70728-1.
3. Sajeesh, P., Sen, A.K. Particle separation and sorting in microfluidic devices: a review. *Microfluid Nanofluid* 17, 1–52 (2014). doi: 10.1007/s10404-013-1291-9.
4. Zhang, S., Wang, Y., Onck, P. *et al.* A concise review of microfluidic particle manipulation methods. *Microfluid Nanofluid* 24, 24 (2020). doi: 10.1007/s10404-020-2328-5.

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИ-ДВУМЕРНЫХ КОЛЛОИДАХ С РЕГУЛИРУЕМЫМ МЕЖЧАСТИЧНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Кохановская А.В.¹, Денисенко И.Р.¹, Насыров А.Д.¹, Шишков И.Н.¹,
Крючков Н.П.¹, Яковлев Е.В.¹

¹МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия
yakov.egor@gmail.com, sashakv7@gmail.com

Исследования с колloidными суспензиями предоставляют широкие возможности для изучения фундаментальных процессов, происходящих в нано- и микрометровых масштабах. Одним из преимуществ использования микрочастиц считается возможность их регистрации в реальном времени с помощью видеомикроскопии, что невозможно в системах атомов и молекул. Более того, в колloidных системах можно регулировать взаимодействия между частицами с помощью внешних полей [1 – 4]. Коллоиды с управляемыми взаимодействиями позволяют исследовать кристаллизацию, плавление, конденсацию и другие молекулярно-подобные явления на уровне отдельных частиц [5, 6]. Во внешних полях также возможно использовать биологические частицы, например, тканевые сфериоиды, умение управлять которыми является основой перспективной технологии 3Д-принтинга биосовместимых материалов.

На сегодняшний день актуальной задачей в области мягкой материи является изучение процесса самосборки коллоидов во внешних вращающихся магнитных полях. Подобные системы ранее детально не рассматривались. Так, при различных параметрах поля были экспериментально продемонстрированы разные уникальные квази-двумерные структуры, которые до этого не наблюдались в системах с регулируемыми взаимодействиями.

В качестве образцов в работе использовались объемно наполненные оксидом железа суперпарамагнитные частицы полистирола и диоксида кремния, диспергированные в деионизованной воде. Суспензия помещалась в кювету между двух покровных стекол с гидрофобным покрытием, разделенных тонкой прослойкой. При внесении кюветы с образцом в магнитное поле, микрочастицы поляризовались, и между ними появлялось взаимодействие, приводящее к самосборке системы.

В рамках проекта был исследован новый тип потенциалов взаимодействия – динамически изменяемые потенциалы. Такие

потенциалы обеспечивались изменением угла прецессии с частотой, сравнимой со временем диффузии микрочастиц в системе. Таким образом, в системе создавалось периодическое изменение взаимодействия – переключение с притяжения на отталкивание. Вид системы в экспериментах зависел от диапазона углов, которые, в свою очередь, задавались параметрами поля: амплитудой, оффсетом, фазой и частотой.

В результате работы путем изменения перепада углов были получены различные конфигурации систем микрочастиц (примеры представлены на рис. 1).

Таким образом, понимание динамики частиц в описанных условиях расширит применение коллоидов, как модельных систем для поисковых и технологических исследований в материаловедении, биологической и молекулярной физики, физики конденсированных сред и других современных науках.

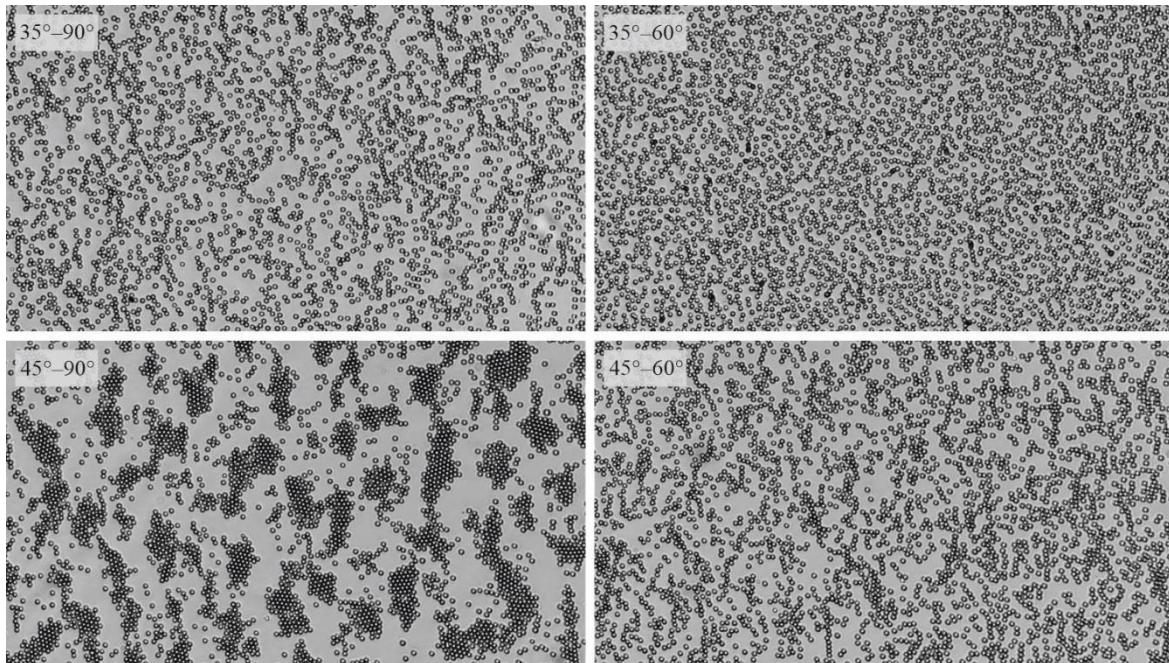


Рис. 1 Фото экспериментальной системы при различных диапазонах углов раствора конуса поля

Работа выполнена при поддержке Грантов РНФ № 22-72-10128 и № 20-72-10161 на базе МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Литература

1. Bharti B. et al., *Soft Matter*, **12**, 37, 7747-7758, **2016**
2. Yakovlev E. V. et al., *J. Colloid Interface Sci.*, **608**, 1, **2022**
3. Li, D. D. et al., *Comput. Part. Mech.*, **9**, 2, 315-333, **2022**

4. Spatafora-Salazar A. et al., *Soft Matter*, **17**, 5, 1120-1155, **2021**
5. Yakovlev E. V. et al., *Scientific reports*, **7**, 1, 13727, **2017**
6. Padidela U. K. et al., *Phys. and Chem. of Liq.*, **58**, 5, 603-622, **2020**

ВЛИЯНИЕ КОНТАКТА С ПОВЕРХНОСТЬЮ ФЕРРОМАГНИТНОГО МЕТАЛЛА НА МАГНИТНУЮ РЕЛАКСАЦИЮ В МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНИТАХ ПРИ ИХ ПРЕССОВАНИИ

Куницына Е.И., Моргунов Р.Б.

ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН
kunya_kat@mail.ru

Цель современной молекулярной спинtronики — создание устройств нового поколения из одной или нескольких молекул. В квантовых технологиях исследователи разрабатывают молекулярные спиновые кубиты с длительным временем квантовой когерентности и возможностью выполнения квантовых операций. Перспективными материалами в этих областях являются мономолекулярные магниты (ММ). Однако их релаксация часто происходит слишком быстро, что не соответствует требованиям квантовой декогеренции. Решением является использование внешнего магнитного поля, которое сдвигает время релаксации в нужный диапазон частот.

В нашей работе мы исследовали взаимодействие ММ с ферромагнитными микрочастицами, что важно для интеграции этих молекул в гибридные металлоорганические структуры и создания молекулярных спиновых клапанов. Мы показали метод функционализации микропорошков молекулярных магнитов и установили, что введение комплексов Er^{3+} в ферромагнитные среды изменяет их магнитную релаксацию. Обнаружены два способа влияния микрочастиц на релаксацию ионов Er^{3+} : химическое связывание с поверхностью металла и магнито-дипольное взаимодействие, обусловленное остаточной намагниченностью матрицы. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) показала окисление 10-координационного комплекса при контакте с поверхностью металла.

Работа выполнена в рамках тематической карты Института проблем химической физики РАН 124013100858-3

НЕЛОКАЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС ИНФОРМАЦИИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

(По мотивам монографии Ланкин А.В., Норман Г.Э. Новости, основания и проблемы квантовой механики. Неокопенгагенская парадигма. М.: Физматлит. 2023).

Ланкин А. В.^{1,2}

¹ОИВТ РАН, ²МФТИ(НИУ)

alex198508@yandex.ru

Понятие информации, как квантовой, так и классической, играет в квантовой механике существенно большую роль, чем в классической теории. При формулировке классической теории информация выступает лишь удобным дополнительным инструментом при описании процессов, и само это понятие не является обязательным. Классическая теория в замкнутом внутренне-непротиворечивом виде может быть сформулирована вообще без его использования. Однако, в квантовой механике это не так. Не вводя понятие информации, в принципе, невозможно сформулировать квантовую теорию измерений в общем случае. При этом в квантовой механике открытых систем коллапс волновой функции в результате обмена информацией квантовой системы с окружением является не менее важным фактором эволюции квантового состояния системы, чем унитарная эволюция, описываемая уравнением Шредингера. В результате, не рассматривая понятие информации и обмен ею между квантовой системой и средой, нельзя сформулировать и замкнутые уравнения эволюции открытой квантовой системы. Эта особая роль информации в квантовой механике формализуется обобщением постулата фон Неймана, которое называется информационным принципом [1].

Такая роль информации в квантовой механике порождает особый класс нелокальных квантовых явлений, которые получили название контрафактных измерений. Общей особенностью явлений этой группы являются специфические проявления нелокальных взаимодействий между удаленными частями системы и нарушения макроскопического реализма. При этом данные явления наблюдаются не для систем нескольких частиц в переплетенном (entangled) квантовом состоянии, как это имеет место при наблюдении нарушения неравенства Белла или в протоколе квантовой телепортации, а для одиночной квантовой частицы. Характерной особенностью этих явлений является передача битов информации без реального переноса энергии или частицы по

каналу связи. В большинстве случаев протоколы, где может наблюдаться данный эффект, используют квантовый эффект Зенона. К контрафактным измерениям также близок эффект квантового Чеширского кота, когда частицы, т. е. связанная с ней масса, и какое-то другое её свойство (скажем спин) могут наблюдаться в разных точках пространства. При контрафактных измерениях и в эффекте квантовый Чеширского кота наблюдается отрыв информации от материи, когда информация распространяется в области пространства, куда реальные частицы никогда не попадают. Эффект может наблюдаться как для бозонов, так и для фермионов.

Обсуждается роль информационного принципа в квантовой механике и его связь с нелокальностью. Рассмотрен протокол контрафактной связи в качестве примера процесса, где нелокальные квантовые явления наблюдаются без участия переплетенных квантовых состояний. На основании этого сформулирована проблема природы возникновения нелокальности в квантовой механике. Рассматривается вопрос о том, являются ли переплетенные квантовые состояния необходимым условиям для возникновения нелокальных корреляций в квантовых системах или нелокальность является отдельным свойством квантовых систем, в общем случае не связанным с существованием переплетенных квантовых состояний. Обсуждается нарушение принципа макроскопического реализма в квантовой механике, и на примере контрафактных процедур показывается самостоятельная роль информации как элемента квантовой системы.

Рассматриваются проявления таких нелокальных квантовых явлений в твердых телах [2, 3]. Обсуждается возможность применения контрафактных процессов, связанных с нелокальным переносом информации, при создании твердотельных датчиков [4] и организации квантовых вычислений.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" (соглашение 075-15-2024-200 от 06.02.2024).

Литература

1. М.Б. Менский, Квантовые измерения и декогеренция, Физматлит, Москва, **2001**
2. L. Chirolli et al., Phys. Rev. B, **82**, 045403, **2010**
3. O. Zilberberg, A. Romito, Y. Gefen, Phys. Rev. B, **93**, 115411, **2016**
4. S. Dogra, J.J. McCord, G.S. Paraoanu, Nat. Comm., **13**, 7528, **2022**

ПАРАМАГНОНЫ И РЕЗОНАНСНЫЕ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ ВТСП КУПРАТОВ

Ларионов И. А.

*Институт Физики, Казанский Федеральный Университет,
г. Казань, 420008, Россия
Larionov.MRSLab@mail.ru*

Аналитические выражения для динамических спиновых восприимчивостей, полученные методом проекционных операторов Мори-Цванцига [1] в парамагнитном состоянии, анализируются в области легирования от чистого антиферромагнитного диэлектрика до оптимального легированных (максимум T_c) высокотемпературных сверхпроводящих слоистых купратов.

Исследовано влияние теплового затухания элементарных возбуждений вида спиновых волн (парамагнонов), обусловленное введением носителей заряда, на магнитный отклик исследуемой системы [2,3,4]. Подчеркивается определяющая роль ближнего антиферромагнитного порядка и его температурная и концентрационная зависимости в магнитном отклике, динамической спиновой восприимчивости, слоистых купратов в интервале частот от ядерного магнитного резонанса до неупругого рассеяния нейтронов. Рассчитаны вклады в скорость спин-решеточной релаксации, обусловленные антиферромагнитными спиновыми флуктуациями и спиновой диффузией, при этом вклад от локализованных моментов даже в области легирования, близкой к оптимальному, является значительным [2]. Используемое представление корректно учитывает роль всех волновых векторов зоны Бриллюэна.

Проводится сравнение результатов, полученных в приближении, пренебрегающим затуханием и с учетом теплового затухания элементарных возбуждений парамагнитного вида с использованием лоренцевой формы для динамической спиновой восприимчивости. Более точное единное описание особенностей поведения наблюдаемой экспериментально скорости спин-решеточной релаксации на ядрах меди [5], а также экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов и данных резонансного неупругого рассеяния рентгеновских лучей (RIXS) [6] достигается при учете теплового затухания элементарных возбуждений вида спиновых волн (парамагнонов), обусловленного влиянием легированных дырок в слоистых купратах семейств La-Sr-Cu-O и Y-Ba-Cu-O в диапазоне индексов легирования от 0 до оптимального и температур выше T_c [3,4].

Литература

1. U. Balucani, M. H. Lee, and V. Tognetti, Phys. Rep., **373**, 409, **2003**
2. I.A. Larionov, Phys. Rev. B, **69**, 214525, **2004**; **72**, 094505, **2005**; **76**, 224503, **2007**
3. I.A. Larionov, Solid State Comm., **208**, 29, **2015**
4. I.A. Larionov, Magn. Reson. Solids, EJ, **26**, 24102, **2024** doi: 10.26907/mrsej-24102
5. T. Imai, C. P. Slichter, K. Yoshimura, and K. Kosuge, Phys. Rev. Lett., **70**, 1002, **1993**
6. M. Le Tacon *et al.*, Nature Physics, **7**, 725, **2011**

ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ-РЕЛЕВАНТНАЯ ГИДРОДИНАМИКА В МИКРОФЛЮИДНЫХ ЧИПАХ

Либет П.А.¹, Полянкин Л.Ю.¹, Саридис М.Р.¹, Яковлев Е.В.¹,
Корсакова С.А.¹, Салмина А.Б.^{1,2}, Аверчук А.С.^{1,2}, Розанова Н.А.^{1,2},
Юрченко С.О.¹

¹ МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

² ФГБНУ «Научный центр неврологии», Москва, Россия
libetpa@gmail.com

Микрофлюидные чипы, имитирующие структуру и функцию различных органов, представляют собой перспективный инструмент для изучения физиологических процессов и патологий [1]. Изучение гематоэнцефалического (ГЭБ) и гематоликворного (ГЛБ) барьеров является важным направлением для понимания механизмов развития различных заболеваний и разработки новых методов лечения [2]. Однако большинство существующих моделей микрофлюидных чипов фокусируются только на одном из этих барьеров, что не отражает реальной биологической сложности [3]. В данной работе мы разработали новую модель микрофлюидного чипа, включающую оба барьера - ГЭБ и ГЛБ, что позволяет воспроизвести более реалистичные физиологические условия. Чип состоит из четырех каналов, моделирующих кровеносные капилляры, мозговую паренхиму и полость спинномозговой жидкости (СМЖ).

Для анализа гидродинамических процессов, влияющих на функционирование барьеров, было проведено численное моделирование, основанное на решении уравнений Навье-Стокса.

Моделирование показало, что в каналах чипа реализуется ламинарное течение жидкости, характерное для физиологических условий в кровеносных сосудах и СМЖ. Также было установлено, что уровень сдвигового напряжения жидкости, действующего на барьеры, может быть точно отрегулирован за счет изменения геометрии каналов и скорости потока [4].

Ключевым моментом нашей работы является достижение физиологически-релевантных значений сдвигового напряжения жидкости в областях ГЭБ и ГЛБ, а также нормальных значений скорости потока жидкости в каналах. Сочетание этих параметров создает замкнутую систему, которая позволяет полностью описать поведение моделируемой системы. Учитывая физиологически нормальные значения сдвигового напряжения жидкости и скорости потока в каналах, система воспроизводит необходимое распределение давления в зонах барьеров, обеспечивая необходимый уровень фильтрации.

Этот результат открывает путь для различных приложений и будущих исследований. Разработанная модель микрофлюидного чипа с двумя барьерами – ГЭБ и ГЛБ – представляет собой ценный инструмент для изучения физиологии мозга и гидродинамических факторов, влияющих на его функционирование [5].

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

Литература

1. Abbott, N. Joan, et al., *Acta neuropathologica*, **135**, 387-407, **2018**.
2. Cucullo, L., et al., *BMC Neuroscience*, **12**, 1, **2011**.
3. DeStefano, J.G., et al., *Fluids and Barriers of the CNS*, **14**, 1, **2017**.
4. Wang, X., et al., *Microvascular Research*, **128**, 103930, **2020**.
5. Wevers, N.R., et al., *Fluids and Barriers of the CNS*, **15**, 1, **2018**.

МЕТОДЫ РАСЧЁТА ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ

Лобашев Е.А.^{1,2}, Фоминых Н.А.^{1,2}, Антропов А.С.^{1,2}, Стегайлов В.В.^{1,2}

¹*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*

²*Объединённый институт высоких температур РАН*
lobashev.ea@phystech.edu

Равновесная концентрация точечных дефектов в кристаллической решётке определяется свободной энергией образования соответствующего типа дефектов G_f . Как правило, для оценки этой величины с помощью атомистического моделирования рассчитываются потенциальные энергии образования дефектов при нулевой температуре, а для предсказания температурной зависимости используют гармонический подход. Но если моделирование проводится при температурах, близких к температуре плавления, то G_f может существенно меняться, поэтому температурную зависимость $G_f(T)$ стоит учитывать [1]. Для расчётов ангармонических эффектов можно использовать термодинамическое интегрирование, но точность и сходимость этого метода существенно зависит от особенностей его реализации.

Проведены расчёты $G_f(T)$ точечных дефектов для пяти материалов: железа, алюминия, меди, вюрстита (FeO) и нитрида урана (UN) различными методами. Самый простой и наименее точный из них – расчёт через фононные спектры в гармоническом и квазигармоническом приближениях [2]. Кроме него было использовано три варианта термодинамического интегрирования по параметру потенциала λ [3, 4], один из которых был предложен впервые, а также термодинамическое интегрирование по температуре [5]. Было получено согласие с литературными данными [4, 5]. Все методы были проанализированы, выявлены достоинства и недостатки каждого из них.

С помощью одного из методов проведены расчёты для нескольких межатомных потенциалов, описывающих нитрид урана, в том числе, для потенциала SNAP, разрабатываемого в нашей лаборатории. Сделаны выводы об особенностях потенциалов, которые необходимо учесть при дальнейшей разработке SNAP.

Литература

1. Mosquera-Lois et al., **52**, 5812–5826, **2023**
2. B. Fultz, Prog. in Mat. Sci., **55(4)**, 247–352, **2010**
3. N. A. Fominykh, V. P. Nikolskiy, V. V. Stegailov, Comp. Mat. Sci., **220**, 112061, **2018**
4. P. Korotaev, M. Belov, A. Yanilkin, Comp. Mat. Sci., **150**, 47–53, **2018**
5. B. Cheng, M. Ceriotti, Phys.Rev. B, **97(5)**, 054102, **2018**

МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ ФЛЮИДА ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

В.Г. Лукьянчук^{1,2}, Г. А. Гляудялис^{1,2}, И. М. Сайтов^{1,2},
Н. М. Щелкачев⁴, Н. Д. Кондратюк^{1,2,3}

¹*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*

²*Объединенный институт высоких температур РАН*

³*НИУ «Высшая школа экономики»*

⁴*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН*

На сегодняшний день существует достаточно большое количество работ, в которых исследуется влияние учета квантовых эффектов ядер на термодинамические свойства систем, содержащих водород при высоких давлениях [1,2]. Метод интегралов по траекториям совместно с теорией функционала плотности позволяет эффективно рассчитывать данные поправки [3].

В работе впервые предлагается исследовать влияние данного эффекта на область существования метастабильных состояний (атомарного и молекулярного) жидкого водорода при высоких давлениях (100-200 ГПа) [4, 5]. Освоена техника проведения расчетов в рамках метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям с использованием программных пакетов VASP, PIMD и машинно-обученного потенциала. Обнаружены метастабильные состояния во флюиде водорода, существование которых является однозначным указанием на то, что наблюдаемый переход является фазовым переходом именно первого рода. Этот факт особенно важен для фазовых переходов с малой величиной скачка плотности.

В рамках метода VASP+PIMD рассчитаны изотермы для диапазона температур 700-1500 К. Разработан и успешно применён метод моделирования метастабильных состояний для всех

исследуемых изотерм. Получена фазовая кривая и оценка на метастабильные области. О сохранении молекулярной фазы вдоль метастабильных ветвей свидетельствуют высокие значения высот первых пиков парной корреляционной функции. Получена оценка теплоты фазового перехода через скачок парной энтропии. Рассчитана зависимость электропроводности от давления, на которой явно видны метастабильные ветви.

В рамках машинно-обученного потенциала были рассчитаны коэффициенты диффузии и вязкости, энергия нулевых колебаний атомов, построена фазовая диаграмма на основе автокорреляционной функции скоростей.

Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение соглашение 075-15-2024-200 от 06.02.2024).

Литература

1. B. Cheng, G. Mazzola, C.J. Pickard et al. *Nature* **585**, 217, **2020**
2. P.M. Celliers, M. Millot, S. Brygoo et al. *Science* **361**, 677, **2018**
3. M.A. Morales, J.M. McMahon, C. Pierleoni et al. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 065702, **2013**
4. M. Zaghou, A. Salamat, I.F. Silvera. *Phys. Rev. B* **93**, 155128, **2016**
5. K. Ohta et al. *Sci. Rep.* **5**, 16560, **2015**

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ КАК ПРИЧИНА ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ-ПОЛУПРОВОДНИК И СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА В ЭЛЕКТРИДЕ Ba_2N ПОД ДАВЛЕНИЕМ

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

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия
mazannikova@imp.uran.ru

Электриды представляют собой класс материалов, в которых избыточные электроны локализуются внутри пустот кристаллической решётки, играя роль анионов. В двумерном электриде Ba_2N , согласно экспериментальным наблюдениям, давление индуцирует структурные переходы из фазы с симметрией $\text{R}-3\text{m}$ в $\text{P}-3\text{m}1$ фазу, а затем в $\text{I}-42\text{d}$ при 7 ГПа, сопровождаемые уменьшением размерности электридного

подпространства с 2D до 0D [1]. Тем не менее, в расчётах, проведённых в рамках метода DFT, в этом соединении не происходит перехода от металлической фазы с симметрией P-3m1 к фазе I-42d и при давлениях выше 9.5 ГПа реализуется полупроводниковая фаза с симметрией Cc [2], что противоречит результатам эксперимента.

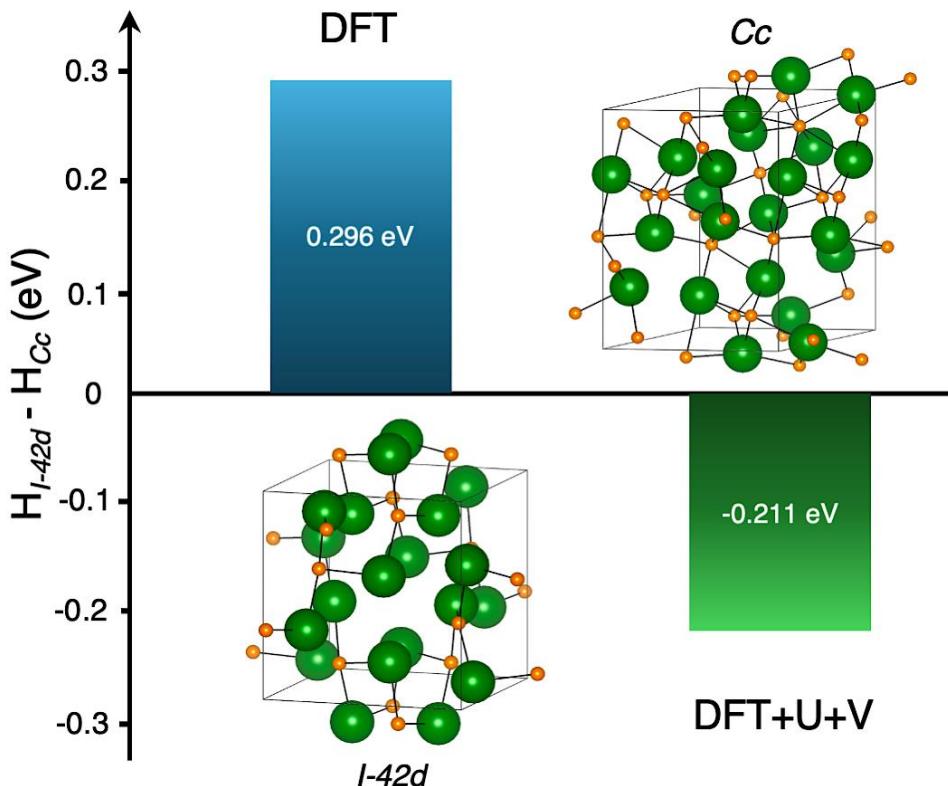


Рисунок 1. Разность энталпий структур I -42d и Cc Ba₂N при давлении 7 ГПа.

В рассматриваемой нами системе наблюдается рост локализации с ростом давления, а значит можно ожидать усиления Кулоновского взаимодействия между соответствующими электронами. Поэтому мы решили учесть эти эффекты в рамках метода DFT+U+V [3]. Используя метод теории возмущений функционала плотности (DFPT) [4], были рассчитаны параметры одноузельного U и межузельного V кулоновского взаимодействия. Учёт электронных корреляций в рамках метода DFT+U+V приводит к качественному изменению зонной структуры и открытию щели в подзоне электридных состояний в I-42d и Cc фазах. В результате перехода металл-полупроводник, меняется энергетический баланс между I-42d и Cc фазами и низшей по энергии при 7 ГПа становится I-42d (Рис. 1), что согласуется с экспериментальными наблюдениями [1].

Таким образом, можно заключить, что, учитываяющий взаимодействия между электронами, принимающими участие в образовании электрических состояний, воспроизводит переход металл-полупроводник, сопровождаемый понижением размерности электрической подсистемы, аналогично изоэлектронному электириду Ca_2N [5]. Кроме этого, учёт Кулоновского взаимодействия между электронами, преимущественно локализованными в межузельных пустотах, позволяет воспроизвести переход металл-полупроводник и приводит к тому, что при давлении 7 ГПа фаза I-42d становится ниже по энергии, чем Cc, что приводит к согласию с экспериментом.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ № 24-12-00024.

Литература

1. Vajenine G. V. et al., Comptes rendus. Chimie, **8**, 11-12, **2005**
2. Zhang Y. et al., Journal of the American Chemical Society, **139**, 39, **2017**
3. Campo V. L., Cococcioni M., Journal of Physics: Condensed Matter, **22**, 5, **2010**
4. Giannozzi P., Baroni S., Springer Netherlands, **2005**
5. Novoselov D. Y. et al., Physical Chemistry Chemical Physics, **25**, 45 **2023**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЭКСИТОНОВ В ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ В РЕАЛЬНОМ ВРЕМЕНИ

Малахов М.А.

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г.

Екатеринбург, Россия

MMalakhov89@yandex.ru

Экситоны играют важную роль в оптическом отклике двумерных магнитных материалов. Это связанные состояния, рассматриваются как квазичастицы, образованные электроном и дыркой. Выполняя моделирование в реальном времени, мы показываем, что ультракороткий (несколько фемтосекунд) УФ-импульс может создавать когерентную суперпозицию экситонных состояний, которая вызывает когерентное движение электронов и дырок между

различными псевдоспиновыми долинами в k -пространстве и в реальном пространстве.

Мы также показываем, что наши теоретические методы расчета [1,2] могут быть применены для описания экспериментов в сверхбыстрой спектроскопии по типу импульс-накачка. В данной работе мы моделируем экситонные спектры и динамику экситонов в реальном времени для монослойных материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием и магнитным упорядочением, такие как китаевский магнетик RuCl_3 .

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (N 23-12-00159).

Литература

1. G. Cistaro et al., Journal of Chemical Theory and Computation **19**, 333, **2023**
2. M. Malakhov et al., arXiv:2309.01190v1, **2023**.

РАСЧЕТ ИНТЕГРАЛОВ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НИКЕЛЯ

Мамонова М. В., Макеев М. Ю.

*Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского
matopovamatv@omtsu.ru*

Константа обменного взаимодействия является феноменологическим параметром, отражающим магнитную симметрию системы. Она может быть связана с микроскопическими параметрами системы, например, с обменным интегралом в модели Гейзенберга. Современный интерес к тонким магнитным пленкам и наноструктурам подчеркивает важность понимания поведения константы обменного взаимодействия при изменении размера системы и наличия интерфейсов. Экспериментально получить константу обменного взаимодействия очень сложно. Работ, в которых оценивается константа для тонких магнитных пленок немного. Теоретически, как правило, константа обменного взаимодействия оценивается косвенными методами, включающими предположения о конкретных моделях магнитного порядка.

В работе исследовались трехслойные структуры, состоящие из ферромагнитных пленок бинарных соединений $Fe_{0.5}Ni_{0.5}$ и $Co_{0.5}Ni_{0.5}$, разделенных немагнитной прослойкой Cu и Cr толщиной в три монослоя.

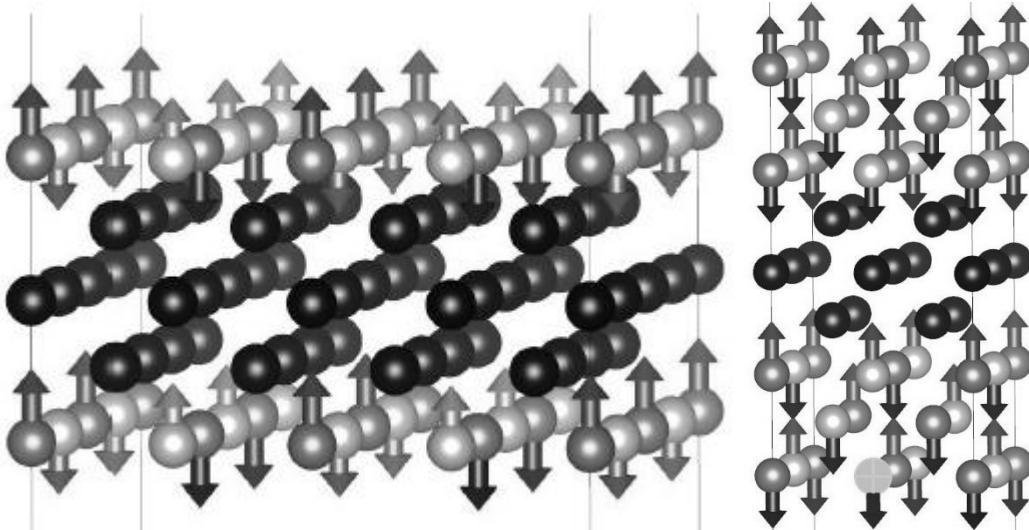


Рисунок 1. Пример антиферромагнитной конфигурации структуры исследуемых бинарных никелевых соединений из 80 и 36 атомов.

Исследования проводились с применением двух подходов: функционала спиновой плотности, реализованного с помощью программного комплекса VASP [1] и метода Коринги-Кона -Ростокера (KKR)(для объемных структур)[2]. Для расчета полной энергии различных спиновых состояний: ферромагнитной и нескольких антиферромагнитных (пример двух из них приведен на рисунке) применялся метод присоединенных плоских волн PAW с псевдопотенциалом в приближении GGA PBE. Магнитный момент атомов был направлен коллинеарно вдоль оси z . Проводилась полная релаксация с учетом сходимости расчетов по энергии порядка 10^{-5} эВ.

Рассчитывались обратная матрица разности числа соседей и разность полных энергий всех антиферромагнитных и ферромагнитного состояния. На основе этих данных, были рассчитаны интегралы обменного взаимодействия J . Более подробная методика расчета и результаты расчетов для пленок чистых металлов представлены в работе [3].

Расчеты показали, что для никелевых соединений характерно ферромагнитное обменное взаимодействие. При этом в антиферромагнитных конфигурациях намагниченность атомов Ni близка или равна нулю.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (соглашение 23-22-00093). Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

Литература

1. P.G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B, **54**, 11169, **1996**
2. T. Huhne, C. Zecha, H. Ebert, Phys. Rev. B, **58**, 10238, **1998**
3. M.Yu. Makeev, M.V. Mamonova, Journal of Siberian Federal University Mathematics Physics, **16**, 773–779, **2023**

РЕЗОНАНСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ И НАНОСТУКТУР

Михалев К.Н.

*ФГБУН Институт физики металлов им М.Н.Михеева УрО РАН,
Екатеринбург, Россия
mikhalev@imp.uran.ru*

Среди локальных методов исследования систем с дальним магнитным порядком и с сильными электрон - электронными корреляциями важное место занимают ядерный магнитный резонанс (ЯМР) и ядерный гамма резонанс (ЯГР), которые эффективно используются в последнее время для изучения магнитных и зарядовых неоднородностей в соединениях и наноструктурах на основе переходных металлов [1]. Резонансная спектроскопия позволяет анализировать на наноскопическом уровне, с одной стороны - спиновое и зарядовое распределение в ближайшем окружении различных ионов, формирующих кристаллическую решетку этих соединений, а с другой – низкочастотную спиновую динамику избирательно на позиции каждого атома в структуре исследуемого соединения. В последнее время было показано, что методы резонансной спектроскопии являются более эффективными при анализе фазового состава наночастиц и нанокомпозитов, чем дифракция рентгеновских лучей.

В предлагаемом докладе дается обзор работ по ЯМР в мanganитах, мультиферроиках, а также по ЯМР и ЯГР в наноструктурах, включая

оригинальные результаты, полученные в ИФМ УрО РАН. В докладе будут затронуты следующие темы:

- особенности метода ЯМР при изучении соединений с сильными электронными корреляциями и дальним магнитным порядком;
- наноскопическое фазовое расслоение и магнитные поляроны в манганитах по данным ЯМР ^{55}Mn , ^{87}Sr , ^{17}O [2,3];
- мультиферроиды и несоразмерные магнитные структуры: делафосситы и квазиодномерные соединения по данным ЯМР ^{63}Cu , ^{17}O , ^{53}Cr ;
- резонансная спектроскопия наночастиц и нанокомпозитов: фазовый анализ и новые размерные эффекты [4,5].

Экспериментальные результаты, обсуждаемые в этом обзоре, получены в рамках Государственной программы (тема «Функция»).

Литература

1. Михалев К.Н., Волкова З.Н., Геращенко А.П. ФММ, **115**, 204, **2014**.
2. A. Trokiner, S. Verkhovskii, Z. Volkova, A. Gerashenko, K. Mikhalev, A. Germov, A. Yakubovskii, A. Korolev, B. Dabrovskii, A. Tyutyunnik. Phys. Rev. B, **93**, 174413, **2016**.
3. A. Germov, A. Trokiner, Z. Volkova, K. Mikhalev, A. Gerashenko, S. Verkhovskii, A. Korolev, I. Leonidov, E. Konstantinova, V. Kozhevnikov. Phys. Rev. B, **96**, 104409, **2017**.
4. A.Yu.Germov, D. A. Prokopyev, K. N. Mikhalev, B. Yu. Goloborodskiy, M. A. Uimin, A. E. Yermakov, A. S. Konev, A. S. Minin, S. I. Novikov, V S. Gaviko, A. M. Murzakaev. Mat. Today Com., **27**, 102382, **2021**.
5. K. Mikhalev, A. Germov, D. Prokopyev, M. Uimin, A. Yermakov, S. Novikov, A. Konev, V. Gaviko, A. Minin. J. of Mag. and Mag. Mat., **563**, 169837, **2022**.

3D–2D КРОССОВЕР И ФАЗОВЫЙ СДВИГ БИЕНИЙ КВАНТОВЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ МЕТАЛЛАХ

Могилюк Т. И.¹, Григорьев П. Д.^{2,3}

¹НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Россия, Москва, пл.
Академика Курчатова, д. 1

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

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

Магнитные квантовые колебания (МКО) традиционно применяются для исследования электронной структуры металлов. В слоистых квазидвумерных материалах МКО имеют ряд качественных особенностей, дающих дополнительную полезную информацию при условии разработки их теоретического описания. В рамках формулы Кубо и самосогласованного борновского приближения рассмотрена фаза биений амплитуды шубниковских осцилляций межслоевой проводимости в квазидвумерных металлах. Показано, что фазовый сдвиг биений шубниковских осцилляций (осцилляций проводимости) относительно осцилляций де Гааза – ван Альфена (осцилляций намагниченности) больше, чем ожидалось ранее согласно теории МКО Лифшица-Косевича [1], и при определенных условиях может достигать значения $\pi/2$, как и наблюдалось экспериментально [2, 3]. Мы объясняем инверсию фазы МКО во время 3D-2D-кроссовера и предсказываем уменьшение относительной амплитуды МКО межслоевого магнитосопротивления в сильном магнитном поле, превышающем частоту биений. Изложенные результаты приняты к публикации в журнале MDPI Physics.

Литература

1. Шенберг Д. *Магнитные осцилляции в металлах*. М., Мир, **1986**
2. P. D. Grigorev, M. V. Kartsovnik и др., Phys. Rev. B, **65**, 060403, **2002**
3. M. Schiller, W. Schmidt, E. Balthes и др., Europhys. Lett. **51**, 82, **2000**

УДАРНЫЕ ВОЛНЫ В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ: SPH МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПОДВИЖНОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

Мурзов С. А.¹, Рублев Г. Д.¹, Жаховский В. В.^{1,2}, Паршиков А. Н.^{1,2}

¹Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики
им. Н.Л. Духова

²Объединенный институт высоких температур РАН

murzovs@gmail.com

Ослабление ударной волны при прохождении через пористую защиту является актуальной задачей обеспечения безопасности. Изучение распространения волны на масштабе локально-неоднородных процессов внутри фронта волны является важным условием при описании компактирования в пористом материале. Метод адаптивного движущегося окна (AMW) [1] для моделирования стационарных ударных волн в движущейся системе координат разработан и применен на примере ударных волн в меди. AMW автоматически регулирует скорость системы отсчета итерационным алгоритмом с обратной связью с целью установления желаемого положения фронта волны внутри расчетной области. Одним из преимуществ AMW является возможность исследования структуры фронта для малых амплитуд волн, которые приводят к частичному компактированию. Моделирование прохождения воздушной ударной волны через систему перфорированных медных пластинок позволяет изучать эффект снижения амплитуды запреградной волны. Решение уравнений механики сплошной среды контактным методом сглаженных частиц (CSPH) [2] позволило исследовать, как характеристики сходимости в упругопластической среде, так и рассчитать ударную адиабату пористой меди. Мы провели сравнение расчетов ударной адиабаты с использованием метода SPH с улучшенной аппроксимацией, основанной на корректировке сглаживающего ядра в зависимости от локальной упаковки частиц. Это позволило уточнить скорость распространения волн.

Литература

1. S. A. Murzov, S. A. Dyachkov, V. V. Zhakhovsky, Comput. Phys. Comm., **298**, 109116, **2024**
2. A. N. Parshikov, S. A. Medin, J. Comput. Phys., **180**, 358, **2002**

ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ В АКТИВНЫХ СИСТЕМАХ С ПРИТЯЖЕНИЕМ

Насыров А.Д., Юрченко С.О., Крючков Н.П.

МГТУ им. Н.Э. Баумана

nasyrovartur151998@gmail.com, kruchkov_nkt@mail.ru

Активная материя — это область физики, изучающая неравновесные системы, состоящие из самодвижущихся частиц, как биологических [1-2] (клетки, бактерии, млекопитающие), так и синтетических [3-6] (янус-частицы, микророботы), движущихся под действием активной силы. Она привлекает внимание исследователей из-за своего распространения в реальной жизни, перспектив в медицине и материаловедении. Из-за большой неравновесности данные системы способны демонстрировать различные явления, которые недоступны для классических равновесных систем с классическим взаимодействием. Одно из таких явлений — фазовое расслоение, вызванное подвижностью (MIPS, от англ. Motility Induced Phase Separation). MIPS в активной материи обусловлен коллективным движением частиц, под действием которого происходит формирование областей с высокой и низкой плотностью. Ключевой особенностью MIPS является возможность его формирования только при больших значениях кинетической энергии частиц и возможность существования без наличия межчастичного притяжения. В противовес MIPS, для фазового расслоения физики равновесных систем требуется наличие межчастичного притяжения, и низкой кинетической энергии частиц. Таким образом, существуют два противоположных механизма формирования фазовых расслоений, и в настоящий момент остается слабо изученным вопрос о том, как данные механизмы взаимодействуют друг с другом.

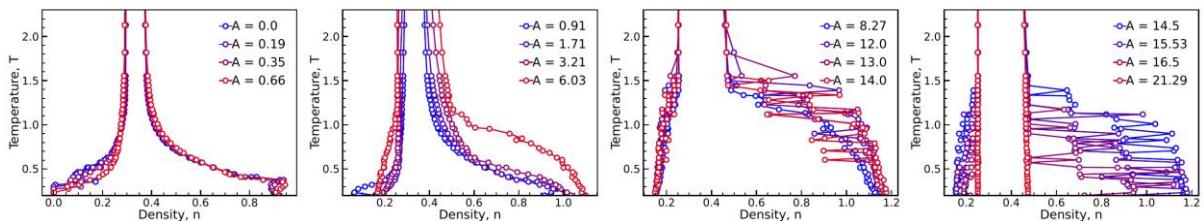


Рисунок 1: фазовые диаграммы активных систем с притяжением.

В настоящей работе была проведена серия моделирований двумерного многочастичного ансамбля активных частиц, взаимодействующих по потенциальну Леннарда-Джонса (ЛД), в

термостате Ланжевена, в диапазонах активности и температур, которые соответствуют классическому фазовому расслоению физики равновесных систем с межчастичным ЛД потенциалом и для активной материи. Было установлено, что при повышении активности системы наблюдается изменение фазовой диаграммы: ветви бинодалей сдвигаются в сторону больших плотностей, а при достижении определенного значения активной силы наблюдается флюктуирующее поведение правой ветви бинодали. На рис.1 показаны фазовые диаграммы в координатах "Плотность-температура" с разными значениями активной силы.

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

Литература

1. T. Vicsek and A. Zafeiris, Physics Reports 517, 71, 2012
2. R. Mayor and S. Etienne-Manneville, Nature Reviews Molecular Cell Biology 17, 97, 2016
3. B. Wang et. al, Advanced Materials 33, 2002047, 2020
4. A.K. Omar et al., ACS Nano 13, 560, 2018
5. D. Vilela et al., ACS Applied Materials & Interfaces 9, 22093, 2017
6. M. Z. Miskin et al., Nature 584, 557, 2020
7. Nikita P. Kryuchkov et al. Phys. Rev. E 107, 044601 2023
8. S. Mandalet et al., Phys. Rev. Lett. 123, 228001, 2019.
9. P. Digregorio et al., Phys. Rev. Lett. 121, 098003, 2018.
10. L. Caprini et al., Phys. Rev. Lett. 124, 078001, 2020.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЖАТИЯ ПОЛОСТИ С ГАЗОМ СОПРЯЖЕННЫМ МЕТОДОМ ГИДРОДИНАМИКИ СГЛАЖЕННЫХ ЧАСТИЦ И КОНЕЧНОГО ОБЪЕМА

А.Н. Нимаков¹, С.А. Дьячков^{1,2}

¹Федеральное государственное унитарное предприятие
«Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики
им. Духова» (ВНИИА), Москва

²Объединенный институт высоких температур РАН, Москва
ANNimakov@vniia.ru, SADyachkov@vniia.ru

Поведение углеводородов в экстремальных условиях представляет фундаментальный и прикладной интерес: например, такие условия

реализуются в центрах планет - газовых гигантов. В этих условиях происходит разрушение химических связей и возможно выделение водорода в виде отдельной фазы, при этом фазовое состояние углерода может быть различным. Сжатие пузырька водорода в такой среде представляет интерес для численного моделирования.

Сеточные и бессеточные численные методы решения задач механики сплошной среды имеют свои преимущества и недостатки, что и определяет их область применимости. В программном комплексе, разрабатываемом во ФГУП «ВНИИА», имеется несколько численных методик решения задач гидродинамики: сеточный метод конечных объемов FVM и бессеточный метод сглаженных частиц SPH [1]. FVM позволяет с высокой точностью моделировать сжимаемые среды без прочности, однако для моделирования сред с прочностью, подверженных сильным деформациям, мы можем использовать только SPH.

Для решения задачи сжатия шарика углерода водородом предлагается использовать алгоритм сопряжения методов FVM и SPH, который позволяет выполнять одновременный расчет различными методами в разных пространственных областях. Для моделирования водорода используется FVM, в то время как для моделирования углерода, в связи с тем, что при высоких давлениях он превратится в твердый материал, можно использовать только метод SPH. Для метода конечного объема используется римановский решатель HLLC (Harten, Lax and van-Leer, и C – Contact) [2], а для SPH-метода его аналог. Также вычисляются временные шаги для каждого метода, но в конечном итоге берется минимальный, тем самым сохраняя согласованность методов по временному шагу. На границе раздела в области SPH-частиц создаются призрачные FVM-ячейки, для которых данные пересчитываются с SPH-частиц. А в области FVM-ячеек создаются призрачные SPH-частицы, для которых данные переносятся с FVM-ячеек. Перенос данных происходят по схеме, предложенной в работе [3].

В докладе будут приведены результаты сравнения тестовых расчетов сжатия полости с водородом отдельно методами SPH и FVM, а также с использованием алгоритма сопряжения обоих методов. В качестве референсного решения будет рассматриваться расчет методом молекулярной динамики.

Литература

1. А. Н. Паршиков, Журн. выч. физики, **180**, 1, 2002

2. И. С. Меньшов, Журн. числ. методов в жидк., **76**, 2, 2014

3. L. Chiron, et. al, Journ. of Comp. Physics, **364**, 1, 2018

БУДУЩЕЕ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИИ

по мотивам монографии Ланкин А.В., Норман Г.Э.

Новости, основания и проблемы квантовой механики.

Неокопенгагенская парадигма. М.: Физматлит. 2023

Ланкин А.В.¹, Норман Г.Э.^{2*}

¹ОИВТ РАН, ²НИУ ВШЭ

* gnorman@hse.ru

Приводятся свидетельства того, что развитие науки сейчас замедляется. Обсуждается возникновение новых направлений науки, становление которых обещает новый подъём фундаментальной науки.

В последние десятилетия высказываются мнения, что фундаментальная наука вошла в период упадка [1, 2]. В статье [1] в Nature 2023 используются сведения из 45 млн статей и 3,9 млн патентов за семьдесят последних лет. Применяется новый количественный показатель, который характеризует, как появление новых статей и патентов изменяет сети цитирования. Показано, что число статей и патентов, радикально изменяющих сети цитирования, с каждым годом появляется меньше. Авторы [1] делают вывод о текущем спаде частоты появления новых принципиальных результатов.

В статье [2] в 2005 г. проанализирована частота инноваций между 1455 и 2005 годами. Результаты [1, 2] нормировались на один миллиард жителей нашей планеты для этого же года. Оказалось, что нормированное число инноваций экспоненциально росло в XV–XVIII веках, несмотря на рост населения Земли, проходит через максимум на рубеже XIX-XX веков, а уже в течение XX века темпы инноваций экспоненциально замедляются, т.е. в [1] подтверждён вывод [2].

В прошлом уже давались пессимистичные прогнозы. В конце XIX века лорд Кельвин предположил, что «над физикой стоит ясное небо, все законы уже открыты, осталось только два облачка». В наше время функции лорда Кельвина взял на себя Виталий Гинзбург, который указал на три облачка, сформулировав свои три «великие» проблемы. Мы полагаем, что центральной является вторая— интерпретации и понимания квантовой механики. При её рассмотрении исходным для нас является тезис Э. Леггетта: Quantum mechanics is very much more than just a ‘theory’; it is a completely new way of looking at the world, involving a change in paradigm perhaps more radical than any other in the

history of human thought. Мы дали название новой парадигме – ввели термин «неокопенгагенская парадигма».

Излагаются положения неокопенгагенской парадигмы, как они сейчас видятся: (1) вероятностная природа результатов измерения; (2) неотъемлемость наблюдателя, (3) дуализм волна-частица; (4) квантовые корреляции и декогеренция; (5) нелокальность, отделение информации от материи; (6) понятие информации как меры знания наблюдателя о квантовой системе; (7) проявления квантовых корреляций, когерентности и декогеренции в биологии; жизнь – квантовое явление; (8) отказ от принципа редукционизма.

Парадигма XV – XX веков - парадигма классической физики. Её стержнем являются (лапласовский) детерминизм, обратимость во времени, объективность измерения. Обратимое уравнение Шредингера, квантовая теория поля и стандартная модель вписались в эту парадигму, так как основной задачей в них является вычисление средних значений наблюдаемых, которые детерминированы и не зависят от наблюдателя.

Стержень неокопенгагенской парадигмы – постулат фон Неймана, его развитие и использование. Отличия неокопенгагенской парадигмы от классической: (1) переплетенные состояния, квантовые корреляции и декогеренция, (2) понятие кубита и квантовой информации, (3) информационный принцип как обобщение постулата фон Неймана, (4) возможность отделения информации от материи, (5) квантовые корреляции, когерентность и декогеренция в биологии.

В §28.1 нашей книги составлен хронологический перечень работ, внёсших вклад в становление этих положений: как множились разноплановые экспериментальные данные, как формировались новые понятия, как парадоксальные идеи стали переходить в приложения в средствах связи/криптографии, информатике, метрологии и квантовых вычислениях. Подсчитано число работ, появлявшихся в каждом году периода от эффекта Ааронова–Бома до 2022 г., в расчёте на один миллиард жителей Земли. Точки, полученные усреднением по 20-летним интервалам, легли на экспоненциально растущую зависимость, предсказывая новый подъём фундаментальной науки.

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

Литература

1. M. Park, E. Leahey, R. J. Funk, *Nature*, **613**, 138, **2023**
2. J. Huebner, *Tech. Forecast. Soc. Change*, **72**, 980, **2005**

УПРАВЛЕНИЕ СХЕМНОЙ ВЯЗКОСТЬЮ В МЕТОДЕ SPH ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ СДВИГОВЫХ ТЕЧЕНИЙ СЖИМАЕМОЙ СРЕДЫ

Паршиков А.Н.^{1,2}

¹ВНИИА им. Н.Л.Духова, ²ОИВТ РАН

anatoliy.parshikov@gmail.com

Перечень неоднородных сред, подвергаемых ударно-волновому воздействию, достаточно обширен – это пылевые и пузырьковые экраны, материалы порошковой металлургии, пространственно-армированные композиционные материалы, смеси взрывчатых веществ с инертными добавками и т.п. Ударное воздействие на такой гетерогенный материал приводит к сложному силовому взаимодействию между компонентами, а при развитии скоростной неравновесности – к значительным сдвиговым деформациям на масштабе структуры материала (или в *мезоструктуре*).

Мезомеханическое моделирование напряжённо-деформированного состояния таких гетерогенных сред и локальных процессов в них наиболее целесообразно проводить с помощью контактного метода SPH [1]. Однако этот вариант метода SPH обладает значительной схемной (аппроксимационной) вязкостью, величина которой возрастает линейно с размером SPH-частиц и может на порядки превысить физическую вязкость материалов, что делает корректный учёт вязких эффектов нереалистичным.

Разработан способ уменьшения паразитных вязких напряжений схемного происхождения, для чего в процедуру расчёта взаимодействия SPH-частиц включена поправка в виде корректирующего тензора вязких напряжений, построенного на основе аналитического решения задачи о диффузии вязкого разрыва [2]. Эта процедура позволяет радикально улучшить согласие с экспериментом при моделировании вязких эффектов.

Литература

1. A.N. Parshikov, S.A. Medin, J. Comp. Phys., **180**, 2002
2. A.N. Parshikov, S.A. Medin, G. D. Rublev, and S. A. Dyachkov, Phys. Fluids, **2024**

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННЫЕ ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ТОПОЛОГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ Bi_2Se_3 И WTe_2

Перевалова А. Н.¹, Фоминых Б. М.¹, Наумов С. В.¹, Лукоянов А. В.^{1, 2},
Байдак С. Т.^{1, 2}, Марченкова Е. Б.¹, Марченков В. В.^{1, 2}

¹ Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

² Уральский федеральный университет

domozhirova@imp.uran.ru

Всестороннее теоретическое и экспериментальное исследование новых топологических материалов являются актуальными задачами физики конденсированного состояния. К таким материалам относят трехмерный топологический изолятор Bi_2Se_3 [1, 2] и топологический вейлевский полуметалл WTe_2 [3, 4]. Несмотря на то, что в последние годы эти материалы достаточно хорошо исследованы, имеются вопросы, которым необходимо уделить дополнительное внимание. Целью данной работы является комплексное теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры и электронных транспортных свойств монокристаллов топологических материалов Bi_2Se_3 и WTe_2 .

Монокристалл Bi_2Se_3 был выращен методом Бриджмена-Стокбаргера, а монокристалл WTe_2 – методом химического газового транспорта. Аттестация полученных образцов проводилась с помощью рентгеновского дифракционного анализа, сканирующей электронной микроскопии и рентгеновского энергодисперсионного микроанализа. Электросопротивление и гальваномагнитные свойства измерены стандартным четырехконтактным методом в диапазоне температур от 2 до 300 К в магнитных полях до 9 Тл на установке PPMS-9 в Центре коллективного пользования «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» ИФМ УрО РАН. Теоретические расчеты электронной структуры исследуемых соединений проводились в рамках теории функционала плотности с учетом спин-орбитального взаимодействия с помощью программного пакета Quantum Espresso.

В ходе работы проведено комплексное исследование электронной структуры и свойств монокристаллов Bi_2Se_3 и WTe_2 , включая теоретические расчеты электронной структуры, выполненные с учетом экспериментальных значений параметров кристаллической решетки, анализ температурных и полевых зависимостей магнитосопротивления и сопротивления Холла, оценку параметров

носителей тока на основе данных по эффекту Холла и осцилляциям Шубникова-де Гааза. Установлено хорошее согласие полученных экспериментальных результатов с теоретическими расчетами плотности состояний вблизи уровня Ферми для данных монокристаллов, а также с существующими представлениями о свойствах топологических материалов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 24-72-00168).

Литература

1. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, *Nat. Phys.*, **5**, 438, **2009**.
2. Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y.S. Hor, R.J. Cava, M.Z. Hasan, *Nat. Phys.*, **5**, 398, **2009**.
3. A.A. Soluyanov, D. Gresch, Z. Wang, Q. Wu, M. Troyer, X. Dai, B.A. Bernevig, *Nature*, **527**, 495, **2015**.
4. Y. Wan, L. Wang, K. Kuroda, P. Zhang, K. Koshiishi, M. Suzuki, J. Kim, R. Noguchi, C. Bareille, K. Yaji, A. Harasawa, S. Shin, S.-W. Cheong, A. Fujimori, T. Kondo, *Phys. Rev. B*, **105**, 085421, **2022**.

ФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ СВЕТА НА ПРИМЕРЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО УСИЛИТЕЛЯ БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ

Ремизов С. В.^{1,2,3}, Елистратов А. А.¹

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

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

³*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ), 109028 Москва, Россия*

sremizov@gmail.com

Описание квантовой системы исключительно с помощью функций Грина (как одно-, так и многочастичных) может быть недостаточно информативным и требовать привлечения других методов. В частности, можно использовать методы, основанные на описании квантовой системы в фазовом пространстве, образованном когерентными состояниями. При таком подходе функции Хусими (Q), Глаубера-Сударшана (P) и Вигнера (W) играют роль

псевдовероятностей. Хотя Q-функция всегда положительно определена, она не является настоящей функцией распределения из-за переполненности когерентного базиса. W и P-функции могут в некоторой области становиться отрицательными и это может рассматриваться как мера „неклассичности“ таких состояний.

Впервые фазовый анализ состояний, возникающих при параметрическом усилении, был проделан для оптического параметрического осциллятора (ОПО) [1]. Было показано, что, хотя описание ОПО с помощью W-функции справедливо в любой момент времени, описание с помощью P-функции возможно лишь до определенного момента. Авторами этот эффект объяснялся возникающей сильной корреляцией между соответствующими модами.

Позднее было показано, что W-функцию также можно использовать для исследования запутанности квантовых состояний. Идея заключается в использовании критерия Переса-Городецкого, который говорит о том, что частичное транспонирование „ломает“ матрицу плотности запутанного состояния, в то время как для сепарабельного состояния такое преобразование приводит только к модификации матрицы плотности. На языке W-функции это означает нарушение принципа неопределенности для состояния, образованного из исходного зеркальным отражением в случае, если исходное состояние являлось запутанным [2]. Преимущество данного подхода заключается в том, что для гауссовых состояний системы, состоящей из двух частей, этот критерий является необходимым и достаточным условием сепарабельности.

Мы применили описанные выше идеи для изучения фотонных состояний, возникающих в параметрическом усилителе бегущей волны под действием когерентной накачки. Используя полученные нами ранее квантовый гамильтониан и кинетические уравнения, мы рассмотрели динамику P- и W-функций как для режима степенной, так и экспоненциальной генерации, а также в режиме усиления.

Используя W-функции, нами также были построены матрицы вариаций и на их основе проведен анализ запутанности для состояний сгенерированных фотонов в соответствии с описанным выше критерием Переса-Городецкого.

Литература

1. B. R. Mollow, R. J. Glauber, Phys. Rev, **160**, 1076, **1967**; B. R. Mollow, R. J. Glauber, Phys. Rev, **160**, 1097, **1967**
2. R. Simon, Phys. Rev. Lett., **84**, 2726, **2000**

ЭКРАНИРОВКА УДАРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ПЕСЧАНЫМИ ЭКРАНАМИ

Рублев Г. Д.¹, Паршиков А.Н.^{1,2}

¹ВНИИА им. Н.Л.Духова

²ОИВТ РАН

rublev_gd_97@vk.com

Одной из актуальных задач взрывобезопасности является защита элементов конструкций от воздействия ударных волн. Кроме того, при наличии горючей газовой смеси, ударно-волновое сжатие может привести к воспламенению последней. Одним из способов ослабления интенсивности ударной волны является использование разрушаемого песчаного экрана [1].

В работе проведено моделирование взаимодействия ударной волны с разрушаемыми песчаными преградами. Результаты сравнивались с экспериментальными данными [2].

Литература

1. A. G. John et al., in Proc. 25th Int. Symp. on shock waves, **2005**
2. С. В. Головастов и др. Письма в ЖТФ, 50, 5, **2024**

ГРАФОВЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ КАК НОВАЯ ПАРАДИГМА СОЗДАНИЯ МАШИННО-ОБУЧАЕМЫХ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Рыльцев Р. Е.¹, Щелкачев Н. М.^{1,2}

¹Институт металлургии УрО РАН

²Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина

rrylcev@mail.ru

В последние годы в вычислительном материаловедении наблюдается революционный прогресс, связанный с использованием методов машинного обучения для создания потенциалов межатомного взаимодействия (MLIPs – Machine Learning Interatomic Potentials). Основная идея такого подхода – аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью многочастичных функций общего вида (например, нейронных сетей) используя эталонные значения энергий и сил, полученные в *ab initio* расчетах. Атомистическое моделирование с MLIPs позволяет достигнуть *ab*

initio точности при на порядки меньших вычислительных затратах [1-3].

В настоящее время алгоритмы разработки и использования MLIPs непрерывно совершенствуются: предлагаются новые архитектуры, разрабатываются эффективные методы обучения, растет вычислительная производительность. Одним из наиболее ярких достижений последних лет является новая архитектура MLIPs, основанная на использовании графовых нейронных сетей (GNN – Graph Neural Network). Использование GNN позволяет достичь беспрецедентной точности описания взаимодействия за счет более полного и последовательного учета многочастичных эффектов, а также построения MLIPs обладающих свойством $O(3)$ эквивариантности, которое позволяет обучать модели на меньшем объеме тренировочных данных и с лучшей переносимостью [4-5].

Оказалось, что GNN являются идеальным инструментом для построения т.н. больших атомных моделей (LAM – Large Atomic Models) – универсальных межатомных потенциалов, предварительно обученных на больших наборах *ab initio* данных, содержащих до миллионов конфигураций, охватывающих десятки химических элементов [6-7]. Такие современные силовые поля совершают революцию в вычислительном материаловедении и в ближайшем будущем могут стать основным инструментом для цифрового дизайна новых материалов.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 23-13-00162).

Литература

1. Y. Mishin, Acta Mater., **214**, 116980, **2021**.
2. T. Wen, L. Zhang, H. Wang, E. Weinan, D. J. Srolovitz, Materials Futures, **1**, 022601, **2022**.
3. N. Kondratyuk, R. Ryltsev, V. Ankudinov, N. Chtchelkatchev, J. Mol. Liq. **380**, 121751, **2023**.
4. S. Batzner, A. Musaelian, L. Sun, M. Geiger, J.P. Mailoa, M. Kornbluth, N. Molinari, T.E. Smidt, B. Kozinsky, Nature Comm. **13**, 2453, **2022**.
5. D. P. Kovács, I. Batatia, E.S. Arany, G. Csányi, J. Chem. Phys. **159**, 044118, **2023**.
6. B. Deng, P. Zhong, K. Jun, J. Riebesell, K. Han, C.J. Bartel, G. Ceder, Nature Machine Intelligence, **5**, 1031, **2023**.
7. A. Merchant, S. Batzner, Samuel S. Schoenholz, M. Aykol1, Nature, **80**, 624, **2023**.

МЕТОД МОНТЕ КАРЛО ДЛЯ МОДЕЛИ ТРИПЛЕТНЫХ БОЗОНОВ В НИКЕЛАТАХ

Рюмшин В. С.¹, Нужин С. В.¹, Панов Ю. Д.¹, Москвин А. С.^{1,2}

¹Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет

²Институт физики металлов УрО РАН

vitaliy.riumshin@urfu.ru

Своеобразие физических свойств ортоникелатов RNiO₃ (где R — редкая земля или иттрий) делает эти материалы объектами постоянных исследований с использованием все более современных экспериментальных методов [1, 2]. Это позволяет уточнять их фазовую диаграмму, которая для разных соединений содержит металлическую неупорядоченную фазу, диэлектрическую фазу с зарядовым упорядочением, антиферромагнитную фазу и неколлинеарные магнитные структуры, что приводит к таким особенностям физических свойств, как переходы металл-изолятор и необычное поведение проводимости.

Ранее нами рассмотрена модель, в рамках которой ортоникелаты рассматриваются как ян-теллеровские магнетики, для которых неустойчивость относительно реакции анти-ян-теллеровского диспропорционирования приводит к формированию системы эффективных спин-триплетных композитных бозонов [5]:

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (\hat{B}_i^{\sigma\dagger} \hat{B}_j^{\sigma} + \hat{B}_j^{\sigma\dagger} \hat{B}_i^{\sigma}) + V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j + J \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{s}_i, \hat{s}_j),$$

где t — перенос спин-триплетного бозона по ближайшим соседям, V — параметр межцентрового заряд-зарядового взаимодействия, J — обменный интеграл.

В приближении среднего поля (ПСП) для различных значений параметров модельного никелата были построены фазовые диаграммы, которые демонстрируют конкуренцию фаз зарядового упорядочения, антиферромагнитного изолятора и спин-триплетного сверхпроводника. Наряду с этими фазами возможны более сложные состояния, когда одновременно отличны от нуля несколько параметров порядка. Эти состояния могут быть реализованы, как однородные, так и в виде фазового расслоения. В хорошо изученной модели локальных синглетных бозонов с помощью численного моделирования показано, что однородная фаза сверхтекучего твердого тела (supersolid) метастабильна по отношению к фазовому расслоению. В рамках ПСП

при конечных температурах для модели триплетных бозонов фазовое расслоение также оказывается более стабильным по сравнению с однородными фазами. Целью работы является проверка данного утверждения, основанного на феноменологическом построении Максвелла, с помощью численного моделирования классическим методом Монте-Карло (МК) с кинематическим учетом постоянства концентрации бозонов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-00196.

Литература

1. M. L. Medarde, Journal of Physics: Condensed Matter, **9**, 1679, **1997**
2. J. Shi, Nature communications, **4**, 2676, **2013**
3. D. J. Gawryluk, Physical Review B, **100**, 205137, **2019**
4. I. I. Mazin, Physical review letters, **98**, 176406, **2007**
5. A. S. Moskvin, Magnetochemistry, **9**, 224, **2023**

АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ДЖОЗЕФСОНА В ПЛАНАРНОЙ СТРУКТУРЕ СВЕРХПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНЕТИК СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Самохвалов А.В.

Институт физики микроструктур РАН, г.Нижний Новгород
samokh@ipmras.ru

Существенное влияние на магнитные и транспортные свойства гибридных систем сверхпроводник/ферромагнетик оказывают спин-орбитальные (СО) эффекты, когда импульс электрона \vec{p} оказывается связанным со его спином. Подобные структуры, у которых одновременно нарушены симметрии относительно обращения времени и пространственной инверсии, демонстрируют два интересных и взаимосвязанных поведения: аномальный эффект Джозефсона [1] и сверхпроводящий диодный эффект [2]. В первом случае речь идет о джозефсоновских φ_0 –переходах с произвольным значением разности фаз φ_0 в основном состоянии и ток–фазовым соотношением $I(\varphi) = I_C \sin(\varphi - \varphi_0)$. Сверхпроводящий диодный эффект подразумевает невзаимный (в более общем случае – анизотропный) транспорт,

который наблюдается, в том числе, и в системах на основе джозефсоновских контактов [3].

Для широкого класса сверхпроводящих структур с планарной геометрией СО эффекты возникают из-за взаимодействия Рашба $v_R [\vec{n} \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma}$ [4] на интерфейсе таких структур. Здесь \vec{n} – это единичный вектор вдоль направления, в котором нарушена симметрия пространственной инверсии, $\vec{\sigma}$ – вектор матриц Паули, а v_R – характерная скорость Рашба. Совместное действие обменного (или зеемановского) поля \vec{h} , СО взаимодействия и сверхпроводящего спаривания приводит к формированию в сверхпроводнике спирального (геликоидального) состояния, которое характеризуется модуляцией фазы сверхпроводящего параметра порядка в направлении $[\vec{n} \times \vec{h}]$ и оказывается бестоковым в пространственно однородных системах.

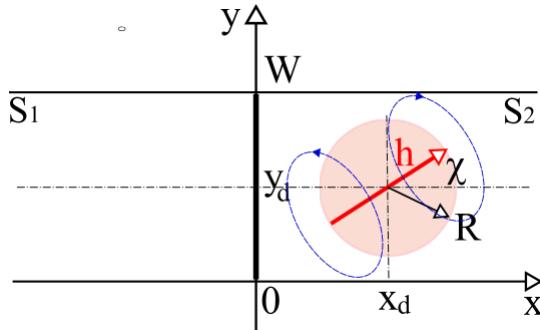


Рис. 1. Схематичное изображение модельной СФ структуры: торцевой джозефсоновский переход в плоскости $x = 0$ и однородно намагниченный ФИ диск радиуса R с центром в точке (x_d, y_d) . Пунктиром показаны линии спонтанного сверхтока тока, создаваемого ФИ диском.

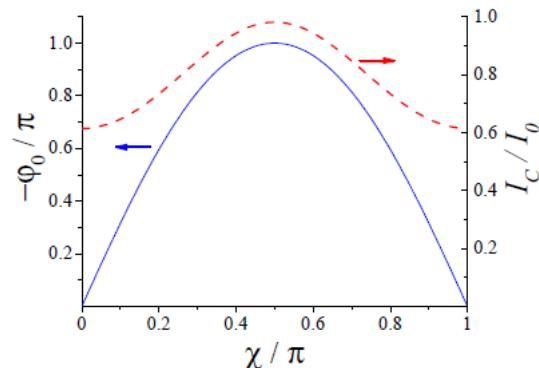


Рис. 2. Типичная зависимость фазового сдвига φ_0 (сплошная кривая) и критического тока I_C (пунктирная кривая) от направления обменного поля ФИ диска χ . Здесь I_0 – максимальный сверхток торцевого контакта.

В докладе рассмотрен пример планарной гибридной структуры (см. Рис.1), состоящей из торцевого джозефсоновского контакта на стыке двух тонких сверхпроводящих пленок, один из электродов которого частично покрыт диском из ферромагнитного изолятора (ФИ) [5]. Обменное взаимодействие между ферромагнитно-упорядоченными ионами ФИ и электронами проводимости металла

вызывает формирование геликоидального состояния только в ограниченной области электрода S_2 , и сопровождается возникновением спонтанного сверхтока, амплитуда и распределение которого зависят как от силы СО взаимодействия, так и от структуры и величины обменного поля. Создаваемый ФИ диском и СО взаимодействием спонтанный сверхток изменяет кинетическую индуктивность электрода, формируя дополнительный набег разности фаз ϕ_0 . Выполнены расчеты критического тока и ток-фазовой зависимости $I(\phi)$ для такой гибридной структуры. На Рис. 2 приведены типичные зависимости фазового сдвига ϕ_0 и критического тока I_C от направления обменного поля в ФИ диске. Таким образом, торцевой джозефсоновский переход и внешняя «фазовая батарея», которая создается ФИ диском в присутствии СО взаимодействия Рашба, формируют гибридный ϕ_0 -контакт с возможностью плавного изменения фазового сдвига ϕ_0 в широком диапазоне от 0 до π .

Работа выполнена при поддержке РНФ проекта № 20-12-00053.

Литература

1. Ю.М. Шукринов, УФН, **192**, 345, **2022**
2. M. Nadeem, et. al., Nat. Rev. Phys., **5**, 558, **2023**
3. C. Baumgartner, et. al., Nature Nanotech., **17**, 39, **2022**
4. Е.И. Рашба, ФТТ, **2**, 1224, **1960**
4. А.В. Самохвалов, Письма в ЖЭТФ, **119**, 508, **2024**

ТРАЕКТОРИИ ВИГНЕРА ДЛЯ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ С НЕПРОНИЦАЕМЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

Сеидов С. С.
НИУ ВШЭ
alikseidov@yandex.ru

Траектории Вигнера представляют собой параметрические кривые $\{x(t), p(t)\}$ в фазовом пространстве системы, построенные по аналогии с траекториями классической системы, определяющими динамику классической функции распределения [1]. Подход основывается на идее, согласно которой функция Вигнера $W(x, p, t)$ квантовой системы является квантовым аналогом классической функции распределения $\rho(x, p, t)$. Тогда траектории Вигнера конструируются таким образом, чтобы представить эволюцию функции Вигнера, как эволюцию вдоль

некоторых классических траекторий, то есть, $W(x, p, t) = W(x(t), p(t), 0)$.

Основным препятствием метода является необходимость получения точного выражения для функции Вигнера, на основе которого затем вычисляются траектории. Ранее автором работы был предложен способ нахождения функции Вигнера частицы, движущейся свободно при наличии непроницаемых граничных условий: случаи квантовой ямы, отражения от стенки, движения в бильярде [2]. Было показано, что выражение для функции Вигнера приобретает вид

$$W(x, p, t) = W_0\left(x - \frac{pt}{m}, p\right) *_p G(x, p), \quad (1)$$

где $W_0(x, p)$ – функция Вигнера в начальный момент времени, $G(x, p)$ – некоторая не зависящая от времени функция, определяемая формой граничного условия, символом $*_p$ обозначена операция свёртки по импульсу p .

В настоящей работе выражение (1) используется для получения аналитического выражения для траекторий Вигнера в описанных случаях. Удалось значительно продвинуться в аналитических вычислениях, представив траекторию Вигнера в виде основного классического вклада с квантовой добавкой:

$$x = x_0 + \frac{p_0 t}{m} - \frac{2\theta(x)}{\pi m} \int_0^t \frac{\operatorname{Im}[e^{2ipx} \partial_x f(x, 2x, \tau)]}{\partial_x W_0(\tau) *_p G(x, p)} d\tau.$$

Здесь $f(x, y, t) = \psi\left(x - \frac{y}{2}, t\right)^* \psi\left(x + \frac{y}{2}, t\right)$, $\psi(x, t)$ – волновая функция частицы.

Работа выполнена в результате проведения исследования №24-00-038 “Квазиклассическая динамика квантовых систем: хаотических и пространственно-неоднородных, типа гетероструктур сверхпроводник-магнетик” в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)».

Литература

1. H.-W. Lee, Found Phys, **13**, 61, **1983**
2. S. Seidov, J. Phys. A: Math. Theor, **56**, 325303, **2023**

НОВЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ РАСЧЕТА КОНТАКТНОГО УГЛА БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ В НАНОПОРАХ

А. А. Семенчук¹, И. В. Копаничук^{1,4}, Н. Д. Кондратюк^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

³Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики"

⁴Институт искусственного интеллекта AIRI

semenchuk.aa@phystech.edu

Поверхностные явления определяют поведение жидкостей в пористых средах и на смачиваемых поверхностях. Правильный учет этих явлений лежит в основе точных континуальных моделей [1]. Контактный угол является ключевой величиной, дающей количественную характеристику поверхностных явлений.

В настоящее время не существует общей теории, позволяющей описывать и предсказывать поведение поверхностей раздела смесей в нанопорах. Ранее уже изучался вопрос поверхности в случае полностью не смачивающих жидкостей [2]. В данной работе будет представлено обобщение этой теории для произвольного контактного угла, которая будет лежать в основе нового алгоритма для определения величины контактного угла по профилю плотности.

Для верификации теории использовались методы численного моделирования (молекулярная динамика). Были рассмотрены системы состоящие из смеси н-декана и воды на подложках из кальцита (рис. 1а) и мусковита (рис. 1б). В результате моделирования и применения нового алгоритма получились следующие результаты: для системы на подложке из кальцита контактный угол составил 120° , в литературе приводятся результаты 122° [3] и 116° [4]; в случае системы с подложкой из мусковита угол – 179° , что согласуется с литературой в пределах требуемой погрешности – 163° [5]. Эти результаты показывают корректность разработанной теории и эффективность нового алгоритма.

Разработанная методология после валидации и верификации была использована для определения контактного угла систем с цифровой нефтью, для которых не имеется реальных экспериментальных данных. Были исследованы зависимости контактного угла легкой и тяжелой нефтей на подложках из кварца, кальцита и мусковита при различных температурах, различной солености воды и различных

концентрациях углекислого газа, сероводорода и метана в нефти. Контактный угол систем с легкой нефтью показывал меньшую зависимость от внешних условий для всех типов поверхностей. Тяжелая нефть, в свою очередь, была более чувствительна к внешним условиям и химическому составу, поэтому ее диапазон изменений контактных углов был намного шире. Такое поведение предположительно может быть связано с наличием поверхности-активных веществ в составе тяжелой нефти.

В будущем теоретическая модель будет также проверена на данных, полученных в результате классического DFT. Как дальнейшее обобщение теории планируется рассмотреть случаи с учетом разной энергии взаимодействия фаз, с учетом молекулярной структуры вещества и получить аналитические формулы для случая динамического контактного угла.

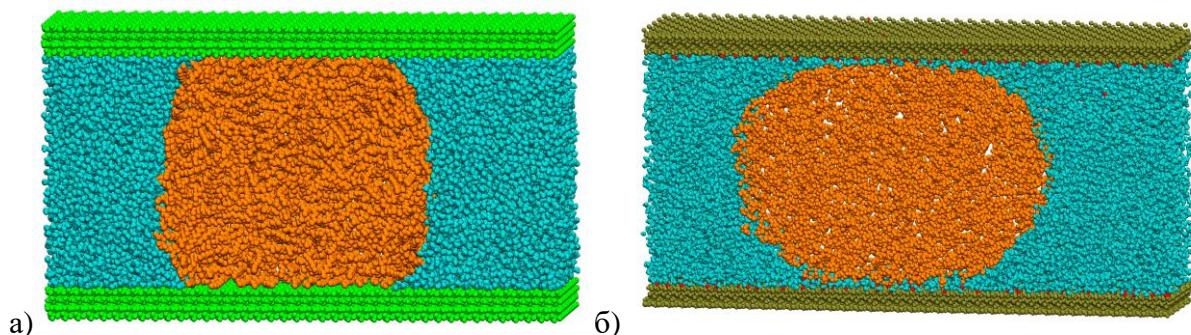


Рис. 1. Смесь н-декана (оранжевый) и воды (голубой) на подложке из кальцита (a) и мусковита (б)

Работа выполнена при поддержке программы стратегического академического лидерства “Приоритет 2030” (Соглашение 075-02-2021-1316 от 30.09.2021).

Литература

1. D. V. Nichita, Fluid Phase Equilib., **492**, 145–160, **2019**
2. I. V. Kopanichuk, A. S. Berezhnaya, A. A. Sizova, A. A. Vanin, V. V. Sizov, E. N. Brodskaya, Colloids Surf., A, **601**, 124884, **2020**.
3. C. O. Metin, J. R. Baran, Q. P. Nguyen, J. Nanopart. Res., **14**, **2012**.
4. R. Gupta, K. K. Mohanty, Transp. Porous Media, **87**, 635–652, **2011**.
5. J. Schultz, K. Tsutsumi, J.-B. Donnet, J. Colloid Interface Sci., **59**, 277–282, **1977**.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Co_2MnAl И Mn_2CoAl

Семянникова А. А.¹, Лукоянов А. В.^{1,2}, Ирхин В. Ю.¹, Шредер Е. И.¹,
Чернов Е. Д.¹, Перевозчикова Ю. А.¹, Марченкова Е. Б.¹,
Марченков В. В.^{1,2}

¹*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*

²*Уральский федеральный университет, Екатеринбург*

semiannikova@imp.uran.ru

Особенности электронной структуры сплавов Гейслера Mn_2CoAl и Co_2MnAl могут приводить к возникновению состояния спинового бесщелевого полупроводника (СБП) [1] и топологического полуметалла (ТПМ) [2, 3], соответственно. В зонной структуре СБП присутствует широкая ($\Delta E \sim 1$ eV) щель вблизи уровня Ферми для электронных состояний с одним направлением спина, а для электронных состояний с противоположным направлением спина имеется нулевая энергетическая щель. ТПМ характеризуется наличием экзотических бесщелевых поверхностных состояний – ферми-дуг. В СБП и ТПМ может быть реализована высокая степень поляризации носителей заряда по спину, что делает такие материалы перспективными для создания устройств спинtronики.

Сильное влияние на формирование кристаллической структуры, электронных и магнитных свойств сплавов оказывает быстрая закалка из расплава (БЗР), поэтому цель данной работы – установление взаимосвязи способа получения сплава (литые и быстрозакаленные) со структурой, электронными и магнитными свойствами соединений Гейслера Mn_2CoAl и Co_2MnAl .

Литой сплав Mn_2CoAl был выплавлен в индукционной печи в атмосфере очищенного аргона, отжигался в течение 72 часов при 650°C в атмосфере аргона с последующим охлаждением до комнатной температуры со скоростью 100 K/час. Сплав Co_2MnAl синтезирован методом дуговой плавки и отожжены при 800 K в течение 48 часов. Затем из объемных соединений с помощью метода БЗР получены быстрозакаленные ленты. Измерение электросопротивления и эффекта Холла проведено стандартным четырехконтактным методом; измерение оптических постоянных – эллипсометрическим методом Битти при комнатной температуре. Измерения электросопротивления выполнены при температурах от 4,2 K до комнатной, а

намагниченности и эффекта Холла при $T = 4,2$ К и в магнитных полях до 70 кЭ. Расчеты электронной структуры исследуемых сплавов Гейслера выполнены методами на основе теории функционала плотности (DFT) с разными типами обменно-корреляционного функционала.

Исследуемые сплавы являются ферромагнитными, поэтому кроме нормального эффекта Холла наблюдается также аномальный. С использованием однозонной модели определен тип носителей заряда, преобладающих в данных соединениях, оценены их концентрация и подвижность. Большая величина аномального эффекта Холла в соединении Co_2MnAl и высокое остаточное сопротивление могут свидетельствовать, согласно [2], о проявлении ТПМ-состояний. На температурной зависимости сопротивления Mn_2CoAl имеется участок с отрицательным температурным коэффициентом сопротивления, что может указывать на близость к состоянию СБП с исчезающе малой энергетической щелью. При изменении микроструктуры в ходе БЗР-обработки наблюдаются существенные изменения в электронных транспортных, магнитных и оптических свойствах сплавов Mn_2CoAl и Co_2MnAl .

Исследования выполнены за счет гранта Российского научного фонда (24-72-00152).

Литература

1. X.L. Wang, Phys. Rev. Lett., **100**, 156404, **2008**
2. K. Manna, Y. Sun, L. Muechler et al., Nat. Rev. Mater., **3**, 244, **2018**
3. S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust et al., Science., **349**, 613, **2015**

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ СПЛАВА ЖЕЛЕЗА С ВАНАДИЕМ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ В УДАРНЫХ ВОЛНАХ

Середкин Н. Н., Хищенко К. В.

Объединенный институт высоких температур РАН

nikser12@yandex.ru

В этой работе представлены уравнения состояния двух металлов (железо, ванадий) и их сплава при высоких давлениях, достигаемых при ударном сжатии.

Для компонентов сплава уравнения состояния строятся на основе термодинамического потенциала свободной энергии, заданной в виде функции от удельного объема и температуры. Хорошее согласие результатов расчета с имеющимися экспериментальными данными по ударной сжимаемости образцов железа и ванадия обеспечивается выбором значений констант, входящих в выражения для свободной энергии.

Для сплава железа с ванадием уравнение состояния строится в предположении теплового и механического равновесия в сплаве. Тогда термодинамический потенциал энергия Гиббса для единицы массы сплава задается в виде суммы произведений массовой доли на удельную энергию Гиббса для каждого компонента при заданных значениях давления и температуры.

С помощью полученных уравнений состояния для металлов и их сплава рассчитаны ударные адиабаты образцов различной начальной пористости. Следует отметить, что для исходно сплошных образцов расчетные значения удельного объема ударно-сжатого сплава близки по значению к сумме произведений массовой доли на удельный объем на ударной адиабате каждого компонента при фиксированном давлении.

Результаты расчетов для сплава находятся в хорошем согласии с данными ударно-волновых экспериментов при высоких давлениях и температурах. Построенные уравнения железа, ванадия и их сплава могут быть использованы при решении задач, связанных с численным моделированием процессов в этих материалах при высоких давлениях за фронтом ударных волн.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЦИФРОВЫХ ДВОЙНИКОВ МЯГКОЙ МАТЕРИИ

Симкин И. В., Яковлев Е.В., Широкова А.А., Швецов А.И., Насыров
А.Д., Денисенко И.Р., Шишков И.Н., Юрченко С.О., Крючков Н.П.

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

vanyasimkin@gmail.com

Мягкая материя, включая коллоидные суспензии, полимеры, клетки и ткани, демонстрирует сложные нелинейные реакции на внешние воздействия: лекарственные средства [1], внешние электрические [2], магнитные [3] поля. Для создания новых материалов

и технологий с заданными свойствами критически важно понимать и предсказывать поведение этих систем. Цифровые двойники, виртуальные модели, имитирующие реальные системы, становятся мощным инструментом во многих областях, включая материаловедение [4-5], коллоидную химию [6], живую мягкую материю [7-8].

Создание точных цифровых двойников для мягкой материи открывает возможности для проведения виртуальных экспериментов, оптимизации процессов самосборки, прогнозирования свойств материалов, ускорения разработки инновационных технологий, возможности испытания лекарственных средств на клеточных культурах.

Разработка цифровых двойников можно разделить на следующие этапы: (i) разработка методов обработки экспериментальных данных, (ii) создание машинно-обученных потенциалов, (iii) разработка цифровых моделей, (iv) валидация моделей и анализ результатов. В первый этап входит применение алгоритмов глубокого обучения для анализа изображений и видео с целью сегментации, определения формы и размеров объектов, трекинга частиц или клеток. Извлечение количественных параметров, описывающих поведение системы (коэффициенты диффузии, параметры взаимодействия, скорости роста). Во втором этапе разрабатывается метод для построения потенциалов взаимодействия между частицами или агентами в системе, основываясь на экспериментальных данных. Для этого используются нейронные сети для аппроксимации многомерных потенциальных энергий, учитывающих различные типы взаимодействий. В третьем этапе создаются модели на основе нейронных сетей, способных моделировать динамику систем мягкой материи с использованием машинно-обученных потенциалов. В заключительном этапе проводится сравнение предсказаний модели с результатами экспериментов и теоретическими предсказаниями.

В работе показано применение разработанных алгоритмов для анализа живой и неживой мягкой материи, а именно изображений астроцитов, нейронов, клеточных сфероидов, полученных методом фазово-контрастной микроскопии, а также коллоидных микрочастиц, находящихся во внешних управляющих полях. Проведено обучение нескольких моделей глубокого обучения (Mask R-CNN, YOLOv8) для

сегментации объектов исследования на изображениях. Данные результаты послужат для разработки цифровых двойников клеточных ансамблей и систем коллоидных микрочастиц, способных прогнозировать их поведение при различных внешних воздействиях для ускорения исследований и предсказания их поведения без необходимости проводить эксперимент; разработки новых технологий в области биомедицины, материаловедения и нанотехнологий.

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

Литература

1. Kaur D., et al, Inflammopharmacology, **27**, 663-677, **2019**
2. Yakovlev E.V. et al. Sci. rep., **7**, 1–10, **2017**
3. Komarov K.A. et al. Soft Matter, **16**, 35, 8155-8168, **2020**
4. Kalidindi S. R. et al. Frontiers in Materials, **9**, 818535, **2022**
5. Wang W. Y. et al. J Mater Inf., **2**, 1, 1-27, **2022**
6. Moud A. A. Colloid and Interface Science Communications, **47**, 100595, **2022**
7. Park S. Y. et al. Current Opinion in Chemical Engineering, **33**, 100702, **2021**
8. Yakovlev E. V. et al. Sci. Rep., **14**, 1, 9846, **2024**

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ, МАГНИТНЫЕ И СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ЖЕЛЕЗА И ЕГО СОЕДИНЕНИЙ

Скорняков С. Л.^{1,2}, Белозеров А. С., Катанин А. А., Анисимов В. И.^{1,2}

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского
отделения РАН,

²Уральский федеральный университет имени первого Президента

России Б.Н. Ельцина

skornyakov@imp.uran.ru

Свойства железа и его соединений традиционно привлекают внимание широкого круга исследователей. За последние двадцать лет данный интерес только усилился, что не в последнюю очередь связано с открытием нового класса сверхпроводящих материалов на основе железа (пниктиды и халькогениды), а также с обнаружением сверхпроводимости в эпсилон-фазе железа под давлением [1, 2].

Одним из активно развивающихся направлений исследований является микроскопическое моделирование электронной структуры систем на основе железа, направленное на объяснение особенностей их фазовой диаграммы, в частности, на понимание природы сверхпроводящего состояния.

В данной работе представлены результаты расчетов спектральных, магнитных и сверхпроводящих свойств эпсилон-фазы железа под давлением, а также бинарных халькогенидов — базовых систем сверхпроводников на основе железа. Расчеты выполнены в рамках методики DFT+DMFT, совмещающей теорию функционала электронной плотности (DFT) с теорией динамического среднего поля (DMFT), и позволяющей точно учитывать локальные кулоновские корреляционные эффекты.

Для всех исследованных систем полученные результаты позволяют сделать заключение о ферми-жидкостном поведении в области температур ниже 1000 К. Показано, что влияние кулоновских корреляционных эффектов на спектральные свойства заключается в существенной перенормировке спектральной функции и зонной структуры, рассчитываемых в DFT, в окрестности энергии Ферми. При этом на качественном уровне ни форма спектральных функций, ни поверхности Ферми не изменяется. Вычисленные величины перенормировок эффективной массы квазичастиц, являющиеся количественной характеристикой силы корреляционных эффектов, составляют от 1.5 (33 ГПа) до 1.8 (12 ГПа) для эпсилон-железа и достигают 2 для системы FeSe. Рассчитанные спиновые корреляционные функции и неоднородная спиновая восприимчивость позволили сделать вывод о присутствии в исследуемых соединениях сильных антиферромагнитных флуктуаций и формировании короткоживущих локальных моментов.

Используя данные DFT+DMFT расчетов для эпсилон-железа, были найдены собственные значения и собственные функции многозонного уравнения Бете-Солпитера, анализ зависимости которых от давления позволил предположить спин-флуктуационный механизм сверхпроводящего спаривания. В частности, было установлено, что тенденция к сверхпроводящему спариванию ослабляется под давлением, что может объяснить исчезновение сверхпроводимости эпсилон-железа при 30 ГПа.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект № 24-12-00024).

Литература

1. J. Paglione and R. L. Greene, Nat. Phys. 6, 645 **2010**
2. K. Shimizu, T. Kimura, S. Furomoto, K. Takeda, K. Kontani, Y. Onuki, and K. Amaya, Nature (London) 412, 316, **2000**

ЛОКАЛИЗОВАННАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И ФЕРРОМАГНИТНЫЕ НАНОДОМЕНЫ В ГЕКСАБОРИДАХ RB_6 (R- La, Ce) С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ

Случанко Н. Е.^{1,*}, Азаревич А. Н.¹, Богач А. В.¹, Демишев С.В.¹,
Хрыкина О. Н.^{1,2}, Болотина Н. Б.², Гридчина В. М.^{1,2},
Шицевалова Н. Ю.³, Гаврилкин С. Ю.⁴, Цветков А. Ю.⁴,
Кузнецов А.В.⁵, Габани С.⁶, Флахбарт К.⁶

¹*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия*

²*НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия*

³*Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича,
Киев, Украина*

⁴*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

⁵*Национальный исследовательский ядерный университет (МИФИ),
Москва, Россия*

⁶*Институт экспериментальной физики САН, Кошице, Словакия
nes@lt.gpi.ru*

LaB₆ используется в качестве немагнитного реперного соединения при фундаментальных исследованиях сильно коррелированных электронных систем, включая топологический кондо-изолятор SmB₆, кондо-решетку CeB₆, зонный ферромагнетик EuB₆ и др. Одним из наиболее спорных вопросов, связанных с LaB₆, является наблюдение в нем неполной сверхпроводимости (СП) с $T_c \sim 5.7$ К, обнаруженной Маттиасом с соавт. в 1968 году [1]. Соединение CeB₆ принято считать классическим примером магнитной кондо-решетки с низкими значениями температуры Кондо ($T_K \approx 1-2$ К) и сложной магнитной фазовой диаграммой с орбитальным упорядочением ниже $T_Q \approx 3.3$ К в антиферроквадрупольной (AFQ) фазе и амплитудно-модулированным антиферромагнитным основным состоянием, реализующимся ниже температуры Нееля $T_N \approx 2.4$ К [2].

Недавно было показано [3], что в парамагнитном состоянии CeB_6 реализуется режим фазы Гриффитса с ферромагнитными флуктуациями и наноразмерными кластерами магнитных ионов церия, причем в интервале $T = 8 \div 90 \text{ K} \gg T_{\text{K}}$ наблюдается слабая локализации носителей заряда.

В докладе представлены результаты измерений сопротивления, намагниченности, теплоемкости и теплопроводности RB_6 (R- La, Ce), в сочетании с данными прецизионных низкотемпературных исследований рентгеновской дифракции (XRD) этих гексаборидов при $T=30 \text{ K}$. Для СП в LaB_6 получены оценки длины когерентности $\xi \sim 240 \text{ \AA}$, параметра Гинзбурга-Ландау $\kappa \sim 2$ и константы электрон-фононного взаимодействия $\lambda_{\text{ep}} \sim 0.75$ [4]. В AFQ фазе CeB_6 впервые установлен спин-полярный режим зарядового транспорта, выполнены оценки эффективного магнитного момента ферронов, меняющегося с температурой в пределах $\mu_{\text{eff}} = 1.4 \div 1.9 \text{ \mu V}$. Результаты низкотемпературных XRD экспериментов в LaB_6 и CeB_6 свидетельствуют о формировании трехмерных структур динамических зарядовых страйпов (см., например, рис.1).

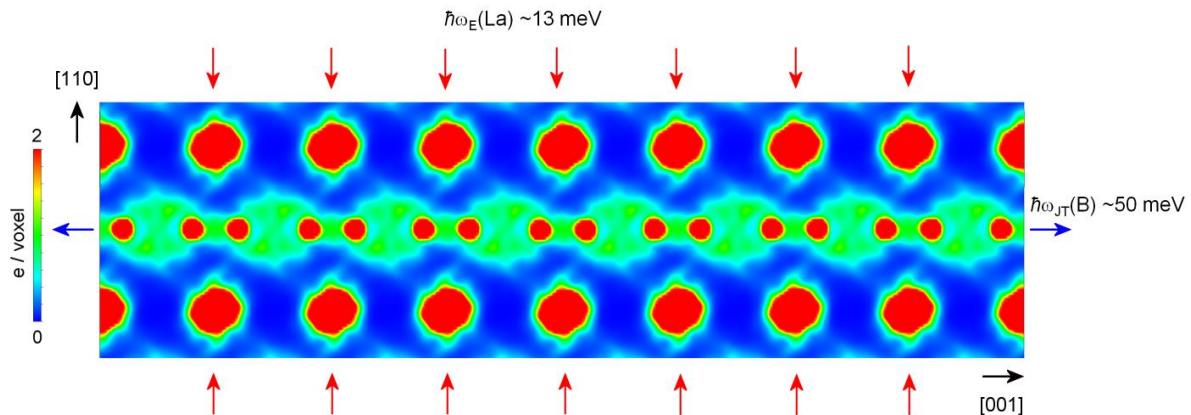


Рис.1. Построенная методом максимальной энтропии карта электронной плотности с динамическим зарядовым страйпом в одной из плоскостей $\{110\}$ и формирующие динамический страйп в LaB_6 яннеллеровская ($\hbar\omega_{\text{JT}} \sim 50 \text{ meV}$) и эйнштейновская ($\hbar\omega_{\text{E}} \sim 13 \text{ meV}$) моды.

Обсуждается сценарий образования в AFQ-фазе CeB_6 ферронов и в СП фазе LaB_6 сверхпроводящих областей субмикронного размера в непосредственной окрестности филаментарных каналов флуктуирующей электронной плотности (динамических страйпов).

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

Литература

1. B. T. Matthias et al., *Science*. **159**, 530, **1968**
2. A. S. Cameron et.al., *Rep. Prog. Phys.* **79**, 66502, **2016**
3. O. N. Khrykina et al., *J. Alloys and Comp.* **970**, 172527, **2024**
4. А. Н. Азаревич и др., *Письма в ЖЭТФ*, **119**, 909, **2024**

ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИЕ ДАТЧИКИ РАЗЛИЧНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

Сокольчик Д. П., Нурмухаметов Д. И., Пономарёв Р. С.
Молодёжная лаборатория интегральной фотоники ПГНИУ
dsokolchik@rambler.ru

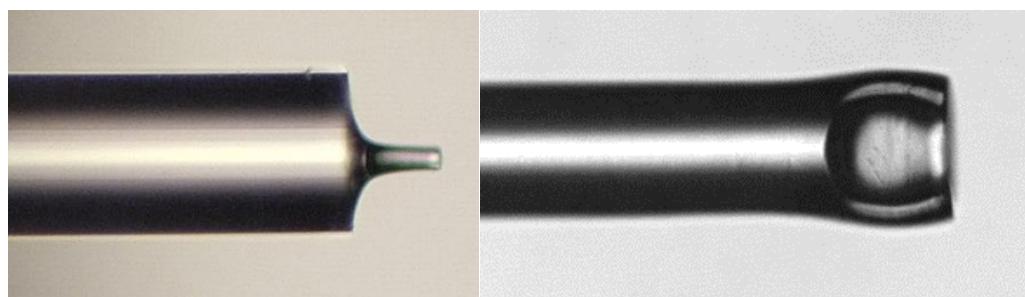
Волоконно-оптические датчики эффективны, просты в изготовлении и обладают низкой себестоимостью. По сравнению с электрическими, датчики на основе оптических волокон характеризуются высоким разрешением, повышенной чувствительностью, электрической пассивностью и устойчивостью к электромагнитным помехам.

Широкое применение в науке и технике находят волоконно-оптические датчики на основе интерферометра Фабри-Перо (ИФП), основной принцип действия которых заключается в интерференции лучей, многократно переотраженных между двумя зеркалами, одним из которых в простейшем случае выступает плоско сколотый торец волновода, а другим – полностью отражающая металлическая пластина [1]. Для измерения физических величин подходят интерферометры с различными геометриями рабочей области. Они могут быть сконструированы из разнообразных оптических элементов [2,3], а также путём формирования различных структур на торце волокна, многообразие которых позволяет измерять различные физические величины без использования дополнительных оптических элементов схемы, что значительно уменьшает их размер и стоимость.

Одной из таких структур, выступающей в качестве чувствительного элемента датчика давления, является оптический «столбик» (рис.1, а), полученный путём полимеризации нанесённого на торец волокна фотополимера с возможностью контроля длины и толщины. Таким образом первым зеркалом является внутренняя плоскость «широкого» торца волокна, а вторым – скол столбика

фотополимера. При нагреве расстояние от первого до второго зеркала увеличивается, что влечёт за собой сдвиг спектра пропускания. Получено, что длина волны максимума интерференционного пика линейно уменьшается с ростом температуры окружающей среды.

При исследовании жидких сред с небольшим поверхностным натяжением интересны датчики давления, температуры и вибрации на основе сформированного на торце волокна полого микрорезонатора (рис. 1, б). Технология получения такой структуры включает в себя несколько шагов. Сформированный в волноводе при помощи плазменного нагрева диффузор – периодическая структура полостей – скальвается под прямым углом и сваривается с одномодовым волокном таким образом, что под влиянием нагрева микрополости диффузора сливаются в одну полость большего размера. При сколе этой полости образуется полый микрорезонатор, который может как герметизирован эластичной диафрагмой, так и напрямую контактировать с исследуемой жидкостью. Колебания давления и температуры приводят к изменению длины рабочей области интерферометра Фабри-Перо, первым зеркалом которого является запаянный конец «пузыря», а в качестве второго выступает эластичная диафрагма (для резонатора закрытого типа), либо граница жидкости (для резонатора открытого типа), и, соответственно, смещению спектра пропускания.



а)

б)

Рис. 1. Фотография структур на торце волокна: а) «столбик» фотополимера, б) полый микрорезонатор

В настоящей работе представлен обзор результатов работы молодёжной лаборатории интегральной фотоники ПГНИУ, включающих в себя волоконно-оптические датчики таких физических величин как температура, давление и вибрация. Освещается технология получения различных структур на торце оптического волокна, а также перспективы их применения.

Исследование выполнено в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования РФ №121101300016-2.

Литература

1. Kilic O. et al. Measurement Science and Technology, 18, 10, 2007,
2. Q. Yu, X. Zhou, Photonic Sensors, 1, 2011,
3. Y. Bai et al. IEEE Photonics Technology Letters. 28, 21, 2016.

ПРОИСХОЖДЕНИЕ КАЛИБРОВОЧНЫХ КОНСТРУКЦИЙ В ТЕОРИИ СТЕКЛА

Сон Л.Д.

ИМЕТ УрО РАН, г.Екатеринбург

ldson@yandex.ru

Калибровочные конструкции возникли в теории поля. Идея принадлежит Янгу и Миллсу и выглядит так (см., например, [1]). Пусть имеется лагранжиан свободного поля, инвариантный относительно однородных преобразований из некоторой группы:

$$L(\psi, \partial_a \psi) = L(A\psi, A\partial_a \psi), \quad A \in G. \quad (1)$$

Взаимодействие можно описать, если потребовать инвариантность относительно неоднородных преобразований. При этом производные заменяются на ковариантные, а к лагранжиану добавляется дополнительный член:

$$\partial_a \rightarrow D_a = \partial_a + F_a^i \gamma_i, \quad L \rightarrow L(\psi, D_a \psi) + \Lambda(F_a^i) \quad (2)$$

Здесь γ_i - генераторы группы G , а F_a^i - т.н. поля Янга-Миллса. В низкоэнергетическом приближении лагранжиан (2) квадратичен:

$$L = \frac{a}{2} \psi \bar{\psi} + \frac{c}{2} D_a \psi D^a \bar{\psi} + F_a^i M_{ij}^{ab} F_b^j \quad (3)$$

Конструкции типа (1-3) представляют собой основу стандартной модели в теории поля.

Статистическая термодинамическая теория (в т.ч. стекла) имеет дело не с действием, которое представляет собой 4-х мерный интеграл, а с 3-х мерным гамильтонианом канонического ансамбля, для которого нужно вычислять статсумму. Использование калибровочных конструкций типа (3) в качестве эффективного гамильтониана в теории стекла стало весьма популярным [2-3]. Как

правило, при этом возникают проблемы с интерпретацией получаемых результатов (например, при докладе работы [2] на настоящей конференции в 2018 г.). Дело в том, что не существует соответствия (т.е. функциональной связи) между конфигурациями полей $\{\psi, F_a^i\}$ и конфигурациями канонического ансамбля, взаимосвязь существует только на уровне термодинамических потенциалов и средних величин. Как правило, канонический ансамбль может быть задан как совокупность топологических возмущений над некоторым основным упорядоченным состоянием, которые в трехмерной системе представляют собой линейные дефекты (см., например, [4]). Цель настоящего доклада – показать в общем виде, что функциональный интеграл по полям ψ генерирует статсумму по конфигурациям линейных дефектов, а поля F_a^i описывают их взаимодействие. При этом оказывается, что поле ψ является окологритическим (коэффициент a в выражении (3) проходит через нуль), что и обеспечивает «стекольную» динамику системы [5]. Заметим также, что конструкции типа (3) могут использоваться не только для описания стекол, но также для изучения термодинамики и фазовых переходов в ансамблях взаимодействующих линейных объектов различной природы.

Литература

1. А. Кадич, Д. Эделен. Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций. М., Мир, 1987
2. M.G. Vasin, V.M. Vinokur Description of Glass Transition kinetics in 3D XY model in terms of Gauge Field Theory *Physica A* 525 1161–1169 (2019)
3. Hertz J. A. Gauge models for spin-glasses. *Phys. l Rev. B.* 1978; 18(9):4875–4885.
4. Rivier N., Duffy D. M. Line Defects and Tunneling Modes in Glasses. *Journal de physique, Paris*, 1982;43(2):293–306
5. Vasin M. G. Gauge theory of the liquid-glass transition in static and dynamical approaches. *Theoretical and Mathematical Physics*. 2013;174(3):406–420.

**ПЕРВОПРИНЦИПНАЯ МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА
ДИССОЦИАЦИИ ЭКСИТОНА, КАК КЛЮЧЕВОЙ МЕХАНИЗМ
ПЛАЗМЕННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА
В ПЛОТНОМ ФЛЮДЕ ВОДОРОДА И АЗОТА**

Федоров И. Д., Стегайлов В. В.

*Национальный исследовательский университет «Высшая школа
экономики», Москва, Россия*

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия
stegailov@jiht.ru*

Переход теплого плотного флюида водорода из изолятора в проводящее состояние при высоких давлениях (20-400 ГПа) и температурах (500-5000 К) является предметом достаточно большого числа исследований, однако до сих пор нет однозначной картины этого перехода. Кроме того, существует очень близкий переход в плотном флюиде азота и с азотом, в отличии от водорода, проведено довольно мало экспериментальных работ, однако его возможности по сохранению энергии вызывают активный интерес в последнее время.

В данной работе применяется ограниченный метод Кона-Шэма для открытых оболочек (ROKS) в рамках теории функционала плотности (DFT) для моделирования образования и диссоциации локализованных экситонов в плотном флюиде водороде при термическом возбуждении до первого синглетного возбужденного состояния [1-3]. Анализ динамики экситонов с помощью метода локализации Ванье показывает, что ключевым механизмом фазового перехода является диссоциация электрон-дырочных пар, необратимо передающая энергию от ионов к электронным возбуждениям. Модель количественно объясняет ряд ключевых экспериментальных наблюдений, включая большую удельную теплоту перехода, изотопический эффект и различия в наступлении оптического поглощения и отражения. Рассчитанные пороговые температуры и давления для диссоциации экситонов при различных плотностях хорошо согласуются с экспериментальными данными для перехода изолятор-металл. Механизм диссоциации экситонов помогает устранить расхождения между предыдущими экспериментальными и теоретическими исследованиями этого важного фазового перехода в плотном водороде.

Кроме того, в этом докладе также будет проанализирован переход в плотном флюиде азота. Будет показано, что учет электронных

возбуждений позволяет получить более точную картину полимеризации, а также объяснить ряд оптических эффектов, наблюдаемых экспериментально.

Работа выполнена при поддержке по Программе фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

Литература

1. Fedorov I.D., Orekhov N.D., Stegailov V.V. Physical Review B, **101(10)**, 100101, **2020**
2. Fedorov I.D., Stegailov V.V. JETP Letters, **113(6)**, 396-401, **2021**
3. Fedorov I.D., Stegailov V.V. ChemPhysChem, **24(6)**, e202200730, **2023**

НАНОРАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В ОДНОДОМЕННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦАХ ЖЕЛЕЗА

Суворкова Е. В.¹, Гермов А. Ю.¹, Михалев К. Н.¹, Уймин М. А.¹,
Бекетов И. В.², Медведев А. И.²

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

²Институт электрофизики УрО РАН

e.v.suvorkova@mail.ru

В литературе активно обсуждаются новые эффекты, связанные с появлением у наночастиц необычных свойств при уменьшении их размера. Одним из проявлений наноразмерного эффекта в ферромагнитных частицах является переход в однодоменное состояние при уменьшении их размера ниже критического размера однодоменности d_c , который по теоретическим оценкам для железа составляет порядка 14 нм [1]. Следует отметить, что эту величину трудно определить экспериментально. Ранее она определялась классическими макроскопическими методиками (измерение намагниченности). Более точные оценки d_c могут быть получены с помощью анализа спектров ядерного магнитного резонанса (ЯМР).

Для наблюдения проявления размерного эффекта и определения критического размера однодоменности были исследованы порошковые наночастицы со средними размерами: $d = 152, 127, 48, 38$ и 18 нм. Последние из них ($d = 18$ нм) были получены газофазным синтезом [2], а остальные – методом электрического взрыва проволоки

[3]. Рентгеноструктурный анализ и дифракция электронов указывают, что преобладающей фазой является α -Fe, также присутствует небольшое количество γ -Fe₂O₃, ввиду взаимодействия частиц с окружающей средой.

В спектрах ЯМР ⁵⁷Fe при $T = 77$ К для эталонного массивного образца железа характерна узкая линия с максимумом на частоте $\nu = 46.5$ МГц, что эквивалентно сверхтонкому полю $H_{hf} = -338$ кЭ. При уменьшении размера частиц наблюдается неоднородное уширение линии, преимущественно в сторону больших частот. Спектры наночастиц с d от 152 до 38 нм можно отписать суперпозицией двух линий: $\nu_1 = 46.6$ МГц и, более широкой, $\nu_2 = 46.7$ МГц. Спектр образца наночастиц с $d = 18$ нм однородно уширен, а также смещен относительно спектров более крупных наночастиц в область высоких частот ($\nu = 46.9$ МГц, $H_{hf} = -340$ кЭ), что свидетельствует о том, что данные частицы полностью однодоменны. Увеличение сверхтонких полей обусловлено размагничивающим полем H_d [4], поскольку суммарное локальное поле определяется как:

$$H_{loc} = H_{hf} - H_d.$$

Однако полученное значение $H_d = 2$ кЭ существенно меньше теоретического и определенного в прошлых работах $H_d = 7.3$ кЭ [4, 5]. Вероятнее всего, из-за магнитного взаимодействия частиц, которое также приводит к значительному уширению линий. Из-за наличия распределения частиц по размеру, однодоменные наночастицы находятся в магнитном поле более крупных многодоменных частиц, что является причиной снижения сверхтонких полей. Чего не наблюдается в работе [5], поскольку железо было покрыто углеродной оболочкой.

Таким образом, в работе наглядно показан переход в однодоменное состояние и более точно определен критический размер однодоменности, который находится в диапазоне $18 < d < 38$ нм. Данные согласуются с результатами прошлых работ с наночастицами железа в углеродной оболочке [5], однако в данном случае наблюдается снижение эффекта увеличения локальных полей ввиду магнитных взаимодействий между частицами.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», Г.р.№ 122021000035-6).

Литература

1. Leslie-Pelecky D. L., Rieke R. D., *Chem. Mater.*, **8**, 8, 1, **1996**
2. Tsurin V. A. et al., *Phys. Solid State*, **56**, 2, 287, **2014**
3. Omelyanchik A. et al., *J. Magn. Magn. Mater.*, **484**, 196-200, **2019**
4. Dho J. et al., *Journal of Magnetics*, **1**, 1, 14, **1996**
5. Germov A. Y. et al., *Mater. Today Commun.*, **27**, 102382, **2021**

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СЛОИСТЫХ АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТАХ ПРИ КРУЧЕНИИ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Сундеев Р. В.^{1,2}, Шалимова А. В.², Рогачев С. О.³, Глезер А. М.,
Черногорова О. П.⁴, Ситников Н. Н.⁵

¹ РТУ МИРЭА, Москва, Россия

² ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П.Бардина», Москва, Россия

³ НИТУ «МИСиС», Москва, Россия

⁴ ИМЕТ А.А. Байкова РАН, Москва, Россия

⁵ АО ГНЦ «Центр Келдыша», Москва, Россия

sundeev55@yandex.ru

В работе представлены результаты поведения естественного слоистого аморфно-кристаллического композита $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ с одинаковыми по химическому составу, но различными по структуре фазами в ходе деформации кручения под высоким давлением (КВД) при комнатной температуре. Использовались различные методы структурных исследований: растровая электронная микроскопия, высокоразрешающая просвечивающая электронная микроскопия, рентгеноструктурный анализ. Проводилось измерение твердости индентирования и модуля индентирования по поперечному сечению образцов. Фиксацию силовых параметров деформации (момента кручения), реализуемых в ходе КВД, испытания образцов сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ в трех исходных структурных состояниях (аморфном, кристаллическом и композит) проводили *in situ* на специализированной установке. Выделены три области композита, различающиеся по структуре: аморфная, кристаллическая и переходная. Показано, что в различных частях композита – кристаллической и аморфной, в ходе КВД одновременно осуществляются два различных механизма деформации.

Также проведены детальные исследования механизмов консолидации мульти металлического композита из двух разнородных сплавов $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ и $Fe_{50}Ni_{33}B_{17}$ в ходе деформации КВД при комнатной температуре. В ходе исследования этого процесса применялись различные структурные методы исследования: рентгенофазовый анализ, просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения, сканирующая электронная микроскопия с электронным микрозондовым анализатором в режиме отраженных электронов. Установлено наличие консолидации разнородных слоев в ходе КВД. Исследованы структурные аспекты процесса консолидации. Выявлено, что ведущую роль в консолидации разнородных слоев при КВД играет способ соединения материалов путем их совместной большой пластической деформации.

ВЛИЯНИЕ РАВНОКАНАЛЬНОГО УГЛОВОГО ПРЕССОВАНИЯ И ГИДРОЭКСТРУЗИИ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА АМЦ

Гангало А.Н., Суровицкий В.Д., Сенникова Л.Ф.

ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А.

Галкина», г. Донецк, ДНР, Россия,

al-gangalo@yandex.ru

Сплавы марки АМЦ характеризуются высокой коррозионной стойкостью, хорошей свариваемостью, обладают высокой жаропрочностью, но имеют низкие прочностные свойства. Поэтому целью данной работы является повышение прочностных характеристик, используя различные виды пластической деформации.

Известно, что обработка металлов методами интенсивной пластической деформации (ИПД) является одним из наиболее перспективных методов получения материалов с высокими физическими и механическими свойствами, так как приводит к формированию нанокристаллической или ультрамелкозернистой структуры [1-2]. Одним из известных методов ИПД, который позволяет обеспечить высокую интенсивность и более однородное деформированное состояние, является равноканальное угловое прессование (РКУП). Однако методы ИПД не являются формообразующими, а предназначены для формирования структуры и свойств материала. Для дальнейшего же получения из этих заготовок изделий необходимо использовать традиционную обработку металлов давлением (ОМД). Одним из методов ОМД, как монотонной

деформации, является гидроэкструзия (ГЭ). Этим методом можно существенно повысить прочность материала за счет создания в очаге деформации более высокого гидростатического давления.

Данная работа является актуальной, так как в работе представлены результаты сравнительного анализа влияния разных схем обработки на механические свойства алюминиевого сплава АМц.

Исходным материалом для исследований служил промышленный горячепрессованный пруток алюминиевого сплава АМц диаметром 60 мм, который деформировали до диаметра 20мм и отожгли при температуре 400^0C , 1 час. Далее полученные образцы сплава АМц деформировали с одинаковой эквивалентной степенью суммарной деформации ($\Sigma\varepsilon = 4$), используя РКУП и ГЭ.

Равноканальное угловое прессование осуществлялось при комнатной температуре с использованием контейнера с углом пересекающихся каналов $\theta = 90^0$, с поворотом заготовки вокруг оси на 90^0 после каждого перехода по маршруту Вс.

Гидроэкструзию также осуществляли при комнатной температуре, используя конические матрицы с углами конусности $2\alpha=20^0$. В качестве рабочей среды использовалось индустриальное масло И30.

В таблице 1 показаны механические свойства АМц после разных схем обработки.

Таблица 1. Механические свойства сплава АМц после разных схем обработки с суммарной деформацией $\varepsilon \sim 4$.

Обработка	σ_b , МПа	$\delta, \%$	$\Psi, \%$	HV, МПа
Отжиг 400^0C , 1 ч	111,7	39,6	87,3	401
РКУП	204,4	13,9	64,4	605
ГЭ	278,2	9,5	30,6	720

На основании анализа полученных результатов исследования, можно сделать следующие выводы.

Наиболее высокими прочностными свойствами обладают образцы после гидроэкструзии, но при существенном снижении пластических свойств. Схема деформации равноканальным угловым прессованием не дает такого повышения прочностных свойств, но зато пластические свойства намного выше, особенно относительное сужение, что характеризует способность материала к пластическому течению, т.е. к формообразованию.

Как видно из приведенной таблицы, характеристика прочности σ_b после этих схем деформации увеличилась в 2 – 2,5 раза, твердость HV

также увеличилась на 50 – 75 % по отношению к отожженному состоянию сплава. Следует отметить, что при равной степени накопленной деформации прочностные свойства сплава после ГЭ на 36% выше, чем после РКУП, а показатель твердости – на 19%.

Литература

1. K. Edalati et al. // Mater. Res. Lett. 2022, Vol 10, No 4, 163-256.
2. Р.З. Валиев, А.П. Жиляев, Т. Дж. Лэнгдон. / Объемные наноструктурные материалы: фундаментальные основы применения. Санкт-Петербург, Эко-Вектор, 2017. - 479 с.

ЭФФЕКТИВНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ КУПЕРОВСКИХ ПАР БЕЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Тихонов Е. С.

ИФТТ РАН

tikhonov@issp.ac.ru

Куперовский сплиттер (КС) — это устройство, позволяющее производить пары электронов, разделенных в пространстве и запутанных по спину. Первая теоретическая работа [1] в качестве такого устройства предложила использовать сверхпроводник, связанный с нормальными терминалами через квантовые точки (КТ) в режиме кулоновской блокады. В этом случае электроны пары вынуждены туннелировать через разные плечи сплиттера из-за конечной зарядовой энергии КТ. Такой механизм транспорта можно описать словосочетанием «расщепление».

Для описания работы КС существенными являются две величины: (i) вероятность расщепления (p_{11}) и (ii) эффективность расщепления (K), показывающая долю тока расщепленных пар в полном токе сверхпроводника. К настоящему времени значительное большинство теоретических работ посвящено изучению КС на квантовых точках, при этом $p_{11} < 1$, а оценка K из эксперимента зачастую не является однозначной. Общепринятым при этом является осознание важности информации, содержащейся в кросс-корреляторе токов через нормальные терминалы (S_{12}). Базовая логика подсказывает, что процессы расщепления дают положительный вклад в S_{12} . Соответственно, так как в находящейся в нормальном состоянии трехтерминальной Ферми-системе кросс-коррелятор всегда

отрицателен, то наблюдение $S_{12} > 0$ в системе со сверхпроводником может означать, что процессы расщепления пары доминируют в полном токе сверхпроводника.

В настоящей работе изучается NSN система с *одномодовыми* нормальными терминалами в приближении нулевой энергии. С одной стороны, описание средних величин и флуктуаций в такой системе можно произвести в соответствии с формализмом матрицы рассеяния для систем со сверхпроводником [2], а с другой стороны – посмотрев на протекание тока как на случайный процесс [3]. При этом, например, введенная выше величина p_{11} соответствует вероятности процесса, когда два электрона куперовской пары оказываются в разных нормальных терминалах. Сравнение выражений для авто- и кросс-корреляторов из двух подходов позволяет получить явное выражение

$$p_{11} = 2 |s_{11}^{ee} s_{12}^{he} - s_{11}^{he} s_{12}^{ee}|^2$$

(или аналогичное эквивалентное ему с заменой индексов терминалов $1 \leftrightarrow 2$). Здесь $s_{ij}^{\alpha\beta}$ – амплитуда вероятности для частицы типа β из j -ого терминала рассеяться в частицу типа α в i -ый терминал. С учетом того, что полный ток сверхпроводника также однозначно выражается через элементы матрицы рассеяния, процесс расщепления в системе без взаимодействия удаётся полностью описать в терминах матрицы рассеяния. Принципиально важным является наблюдение, что процессы расщепления определяются двухчастичной интерференцией, а не просто амплитудой скрещенного андреевского отражения.

Анализ выражений для вероятности и эффективности расщепления показывает, что в зависимости от количества мод, связанных с S-терминалом, NSN система демонстрирует принципиально разное поведение. В случае *одномодового* S-терминала, выражение для p_{11} удается выразить непосредственно через токи в двух плечах сплиттера, а наиболее важным является следующее ограничение

$$K \leq 1/2, p_{11} \leq 1/2,$$

причем оказывается, что наибольшие значения эти величины, вопреки наивным ожиданиям, принимают одновременно с достижением кросс-коррелятором минимального значения $S_{12} = -1$ (величина нормирована на $2e^3 V/h$). В случае же *многомодового* S-терминала вероятность расщепления не выражается явным образом через токи в двух плечах сплиттера, однако оказывается, что и вероятность, и эффективность расщепления могут приближаться к единице. Мы демонстрируем это наблюдение для линейной NSN

системы, которая допускает аналитические выражения для всех рассматриваемых величин.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 22-12-00342).

Литература

1. P. Recher, E.V. Sukhorukov, and D. Loss, PRB **63**, 165314, **2001**
2. M. P. Anantram and S. Datta, PRB **53**, 16390, **1996**
3. E.S. Tikhonov, V.S. Khrapai, arXiv:2311.11954, **2024**

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ $V_2Te_2O_2$

Трифонов И.О.^{1, 2}, Анисимов В.И.^{1, 2}, Скорняков С.Л.^{1, 2}

¹ Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

² Уральский федеральный университет
probrakeup@gmail.com

Двумерные ван-дер-ваальсовские системы представляют собой класс материалов, демонстрирующих необычные физические свойства. Например, некоторые пникиды и халькогениды железа являются высокотемпературными сверхпроводниками, поведение которых во многом является следствием сильных кулоновских корреляций между электронами частично заполненных оболочек [1]. Недавно синтезированное соединение V_2Te_2O представляет собой редкий пример двумерного ван-дер-ваальсового металла. Сравнение экспериментальной оценки электронной теплоёмкости V_2Te_2O с данными расчётов в рамках теории функционала плотности (DFT) указывают на коррелированный характер электронной подсистемы [2].

В данной работе исследуется влияние кулоновских корреляций на электронную структуру V_2Te_2O . Используя гибридную расчётную схему DFT и теорию динамического среднего поля (DMFT), показано, что учет кулоновских корреляций приводит к значительным перенормировкам квазичастичных масс $m^*/m \sim 2.2$ для 3d состояний ванадия, а также позволяет более точно описать, наблюдаемое в эксперименте значение электронной теплоёмкости. Особый интерес вызывает то, что учёт корреляционных эффектов в данной системе оказывает значительное влияние на распределение спектрального веса

в окрестности уровня Ферми, получаемое в DFT. Данный эффект наиболее выражен вблизи точки Γ обратного пространства и заключается в исчезновении дырочного кармана поверхности Ферми, центрированного на направлении Γ -Z зоны Бриллюэна.

Полученные результаты подчеркивают ключевую роль кулоновских корреляций в формировании электронной структуры как исследованного соединения V_2Te_2O , так и других двумерных ван-дер-ваальсовых систем, например $V_2(Se,S)_2O$.

Мы благодарим Российский научный фонд за поддержку в рамках проекта 24-12-00024.

Литература

1. D. J. Scalapino, Rev. Mod. Phys **84**, 1383, **2012**
2. Ablimit, Abduweli, et al., Inorganic Chemistry **57**, 14617, **2018**

АЛГОРИТМ ТЕРМОСТАТА ДЛЯ МОДЕЛИРОНИЯ СИСТЕМЫ ЛОКАЛЬНЫХ БОЗОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Улитко В. А., Пятков А. Ю., Панов Ю. Д.

Уральский Федеральный Университет, 620083, Екатеринбург
vasiliy.ulitko@urfu.ru

При рассмотрении моделей решеточных бозонов распространённым подходом является применение квантового метода Монте Карло (QMC). Несмотря на большое разнообразие квантовых алгоритмов, все они крайне требовательны к вычислительным ресурсам, что приводит к техническим трудностям при построении фазовых диаграмм систем больших размеров. Мы предлагаем квазиклассический подход, основанный на алгоритме термостата. Общей идеей является разбиение решетки на кластеры из небольшого числа узлов, при этом волновая функция системы представляется в виде произведений волновых функций кластера. Взаимодействия внутри кластера рассчитываются точно, а взаимодействие кластера с окружением вводится в виде полей, зависящих от состояний соседних кластеров.

На каждом шаге алгоритма для каждого кластера строится эффективный гамильтониан, диагонализируя который можно получить новое состояние кластера.

В данной работе мы рассматриваем модель локальных (hard-core) бозонов [1]. Ввиду относительной простоты гамильтониана модель

является хорошим кандидатом для аprobации указанной методики. В тоже время различные варианты этой модели используются для описания свойств большого числа физических систем, включающих высокотемпературные сверхпроводники [2], ультрахолодные атомы в оптических решетках [3], экситоны в нанотрубках [4] и магнитные изоляторы во внешнем поле [5]. Гамильтониан модели локальных заряженных бозонов имеет вид:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^+ \hat{a}_j + \hat{a}_i \hat{a}_j^+) + V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j - \mu \sum_i \hat{n}_i,$$

где $\hat{a}_i^+ (\hat{a}_i)$ — операторы рождения (уничтожения), $\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ — оператор числа локальных бозонов на узле, t и V — интеграл переноса и параметр заряд-зарядовых корреляций между ближайшими соседями, μ — химический потенциал.

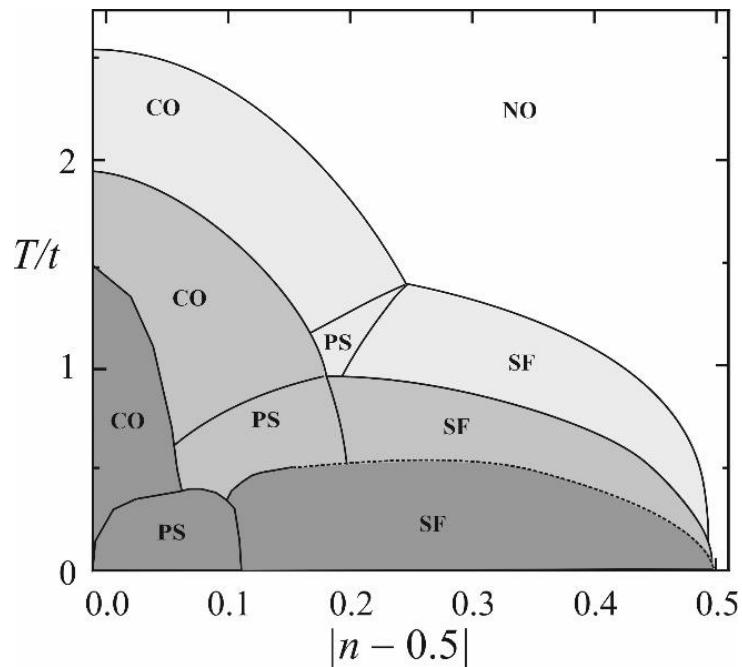


Рис. 1. Фазовая диаграмма при $V/t = 3$. Темно-серые области соответствует результатам QMC, серые — результатам, полученным алгоритмом термостата, светло-серые — приближению Бете.

В работе [6] была построена фазовая диаграмма модели локальных бозонов при помощи QMC. Было показано, что при понижении температуры из неупорядоченной фазы (NO) в зависимости от значения концентрации бозонов n могут образовываться следующие фазовые состояния: зарядовое упорядочение (CO), сверхтекучая фаза (SF) и неоднородная смесь фаз — фазовое расслоение (PS). В работе [7] нами была получена аналогичная фазовая диаграмма в рамках

приближения Бете. В этой работе мы сравниваем результаты моделирования, полученные алгоритмом термостата с результатами приближения Бете и QMC (см. Рис. 1.). Показано, что при качественном сходстве с результатами метода Бете полученные данные ближе к результатам QMC по абсолютным значениям критических температур и положению критических точек существования разных фаз.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках проекта FEUZ-2023-0017

Литература

1. T. Matsubara, H. Matsuda. Prog. Theor. Phys. 16, 569, **1956**
2. N.H. Lindner, A. Auerbach. Phys. Rev. B 81, 054512, **2010**
3. O. Dutta et.al. Rep. Prog. Phys. 78, 066001, **2015**
4. D. Abramavicius et.al. Phys. Rev. Lett. 108, 067401, **2012**
5. T. Giamarchi, C. Ruegg, O. Tchernyshyov. Nature Phys. " 4, 198, **2008**
6. G. Schmid et.al. Phys. Rev. Lett. 88, 167208, **2002**
7. Е.Л. Спевақ, Ю.Д. Панов, А.С. Москвин. ФТГ 63(9), 1355, **2021**

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ ГИДРИДОВ КОБАЛЬТА

Усманов Р. И.^{1,2}, Кулаков В. И.¹

¹ Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка

² Научно исследовательский университет «Высшая школа
экономики», Москва
mephistomadjim@mail.ru

При температурах 500–600 К растворимость водорода в низкотемпературной ГПУ фазе кобальта, помещенного в атмосферу H_2 , монотонно увеличивается с давлением и достигает атомного отношения $\text{H/Co} = x \approx 0.5$ при $P = 6.5$ ГПа. При $P \geq 7$ ГПа растворимость водорода скачком возрастает до $x \approx 1$, и образуется гидрид ГЦК-СоН. Быстрое охлаждение (закалка) синтезированных при высоком давлении образцов CoH_x до температуры жидкого азота предотвращает потерю водорода в процессе последующих исследований при атмосферном давлении. Кристаллическая структура ГПУ и ГЦК

гидридов кобальта изучалась ранее методом нейтронной дифракции. Динамика решетки ГЦК-СоН была исследована методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН). Результаты этих исследований, а также рассчитанный спектр $g(E)$ плотности фононных состояний для ГЦК-СоН приведены в обзорной работе [1].

В настоящей работе спектры оптических колебаний в закаленных образцах ГПУ-СоН_{*x*} с $x = 0.06, 0.091, 0.34$ и 0.51 были исследованы методом НРН при температуре 5 К с помощью нейтронного спектрометра IN1-BeF в Институте Лауэ-Ланжевена (Гренобль, Франция). Спектры акустических колебаний были рассчитаны в приближении DFT-GGA. Полученные НРН спектры были преобразованы в спектры плотности фононных состояний $g_{opt}(E)$, а результаты DFT расчетов – в спектры $g_{ac}(E)$.

Кобальт и его гидриды – ферромагнитные металлы с точками Кюри много выше комнатной температуры. Расчеты DFT-GGA при $T = 0$ К для всех ГПУ и ГЦК гидридов кобальта дали значения спонтанной намагниченности, близкие к экспериментальным из работы [2].

DFT-GGA расчеты также дали значения электронной плотности состояний на уровне Ферми, что позволило оценить электронный вклад $C_{el}(T)$ в теплоемкость гидридов. Из спектров $g(E)$ были рассчитаны температурные зависимости $C_V(T)$ решеточного вклада в теплоемкость. Результатом расчетов стали зависимости $C_V(T) + C_{el}(T)$ в интервале температур 0 – 1000 К для всех гидридов кобальта, изучавшихся экспериментально.

Для проверки пригодности полученных спектров $g(E)$ для термодинамических оценок были проведены калориметрические исследования теплоемкости ГПУ-СоН_{0.51} и ГЦК-СоН с помощью дифференциального сканирующего калориметра DSC-7 фирмы Perkin Elmer. Измерения теплоемкости $C_P(T)$ проводились при атмосферном давлении в диапазоне температур 130 – 190 К. Нижняя граница температурного диапазона определялась возможностями прибора, а верхняя граница – началом выделения водорода из образцов. В пределах погрешности 5% калориметра DSC-7 температурные зависимости измеренных теплоёмкостей $C_P(T)$ не отличались от рассчитанных зависимостей $C_V(T)$.

Таким образом, экспериментально показано, что точность спектров $g(E)$, полученных из НРН измерений, дополненных DFT расчетами, достаточна для расчета температурных зависимостей теплоемкости гидридов кобальта. До настоящего времени спектры $g(E)$

со сравнимой точностью были определены лишь для двух гидридов, AlH_3 [3] и MgH_2 [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта № 23-22-00361.

Литература

1. V. E. Antonov et al., *J. Alloys Compnd.* **905**, 164208, **2022**
2. И.Т. Белаш и др., *ФТТ* **28**, 1317, **1986**
3. V.E. Antonov et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 275204, **2008**
4. A.I. Kolesnikov et al., *J. Alloys Compnd* **509S**, S599, **2011**

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СТАБИЛЬНОСТИ В-С И В-Н КЛАСТЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ DFT РАСЧЕТОВ

Федяева М. А.¹ *, Лепешкин С. В.^{1, 2}, Оганов А. Р.¹

¹*Сколковский институт науки и технологий (Сколтех), Россия,
Москва, Большой бульвар, 30, стр. 1, 121205*

²*Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии
наук (ФИАН), Россия, Москва, Ленинский проспект, 53, стр. 19,
119991*

*femaal.femaal3@yandex.ru

Знание атомных конфигураций и стабильности бор-углеродных и бор-азотных кластеров дает представления о структурных основах и может помочь в объяснении различных свойств низкоразмерных В-С и В-Н соединений, таких как нанокластеры, нанопленки, нанотрубки, кристаллы. Данные объекты могут использоваться в различных приложениях: в качестве наносенсоров для газов H_2 и N_2 , квантовых точек, термоэлектрических преобразователей энергии, подложек для катализа и т.д.^{1, 2}

В настоящей работе с использованием эволюционного алгоритма USPEX³ и DFT расчетов были предсказаны оптимальные атомные структуры кластеров B_nC_m и B_nN_m в широком диапазоне составов ($n, m = 0 - 12$). Была исследована стабильность полученных кластеров с помощью ряда критериев: минимальная производная второго порядка энергии кластера по количеству атомов каждого типа (Δ^2E), энергия фрагментации (E_{frag}), а также HOMO-LUMO щель. На их основе были построены карты, демонстрирующие наличие "островов"

стабильности, соответствующих наиболее устойчивым - "магическим" кластерам, которые склонны более часто образовываться в экспериментах.

Также в данной работе была проведена геометрическая классификация кластеров: были определены плоские/неплоские геометрии, а также выделены четыре основных структурных типа: (перечислить). На основе проведенного анализа были определены кластеры, которые по своим энергетическим и геометрическим характеристикам могут служить строительными блоками, а также промежуточными структурами в процессе синтеза низкоразмерных B-C и B-N соединений.

Работа была поддержана Российским научным фондом (грант № 19-72-30043).

Литература

1. S.J. Lu, B8C10: A C₂v planar polycyclic structure bridged by the central strong CC bond and strengthened by the aromaticity. *Chemical Physics Letters*, 801, p.139715, 2022.
2. M.A. Mileev, S.M. Kuzmin, and V.I. Parfenyuk. Ab initio calculations of structure and stability of small boron nitride clusters. *Journal of Structural Chemistry*, 47, pp.1016-1021, 2006.
3. S. V. Lepeshkin, V. S. Baturin, Y. A. Uspenskii and A. R. Oganov, Method for Simultaneous Prediction of Atomic Structure and Stability of Nanoclusters in a Wide Area of Compositions, *Journal of Physical Chemistry Letters*, 10, 102–106, 2019.

НАНО И МИКРОКРИСТАЛЛЫ НИТРИДА БОРА: СИНТЕЗ, ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И СВОЙСТВА

Филоненко В. П., Шипков А. Н., Зибров И. П.,
Баграмов Р. Х., Ляпин С. Г., Энкович П. В.

Институт физики высоких давлений РАН, Москва, г. Троицк
filv@hppi.troitsk.ru

Нитрид бора является соединением со стехиометрией BN. Его основные кристаллические формы (hBN и cBN) изоструктурны графиту и алмазу. hBN используется в качестве сырья для огнеупорной керамики, как компонент электроизоляционных покрытий и смазок. cBN уступает по твердости алмазу, но имеет более высокую

термическую и химическую устойчивость. Он является основой сверхтвердого лезвийного и абразивного инструмента для обработки закаленных сталей, чугунов и спецсплавов. Композиты на базе алмазоподобного нитрида бора получают при высоких давлениях спеканием порошков cBN со связующими или прямым фазовым переходом hBN [1].

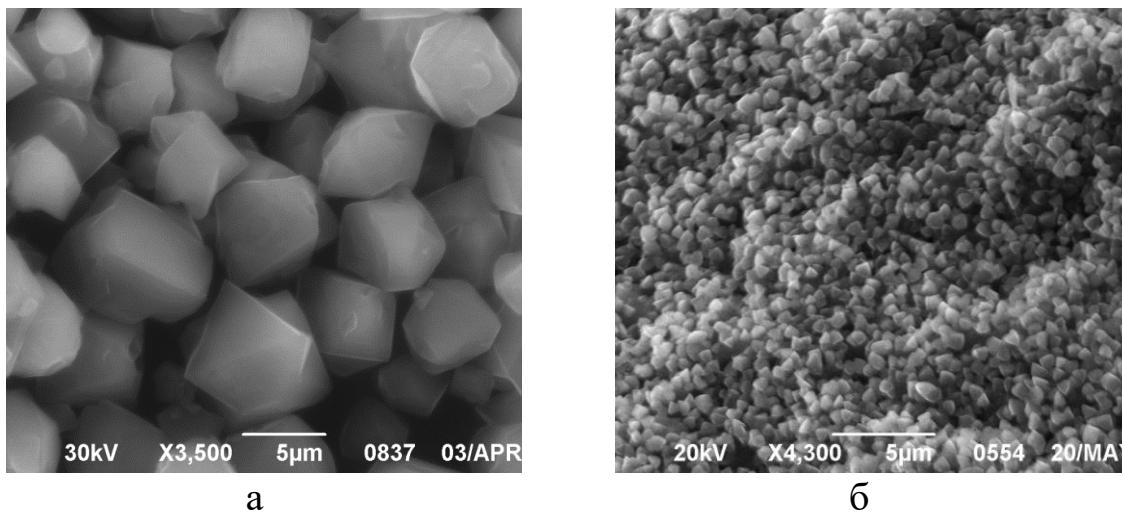


Рис. 1. Морфология кристаллов cBN: (а) - из борана аммония, (б) из порошка hBN с размерами частиц 30 нм

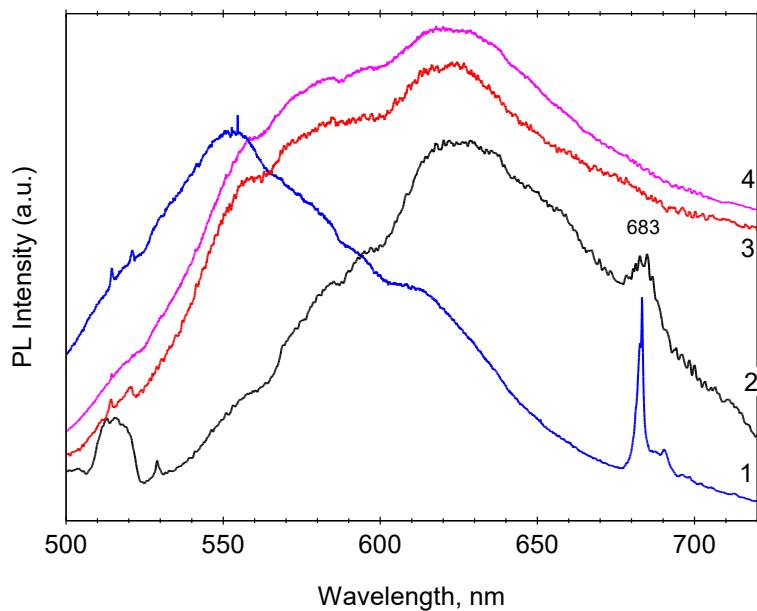


Рис. 2. Спектры люминесценции порошков cBN:
1 – из наноразмерного hBN, 2 – из смеси нитрида углерода с бором,
3 – из микронного hBN, 4 – из борана аммония

Работа по синтезу и изучению особенностей кристаллов сBN на нано- и микроуровне актуальна и имеет целью расширение сферы их практического применения. В качестве исходного материала в работе использованы экспериментальные нанокристаллические порошки hBN с размерами от 20 до 40 нм, коммерческий порошок со средним размером частиц около 1 мкм, боран аммония (H_3BNH_3) и смесь нитрида углерода (C_3N_4) с бором.

Термобарическую обработку прекурсоров проводили в камере тороид при давлениях 6.5-7.5 ГПа и температурах 1400-1600 °С. Показано, что в этих условиях происходит полный фазовый переход в сBN без активаторов или катализаторов. Алмазоподобные кристаллы имеют узкий диапазон распределения, а их средний размер меняется от 50 нм до 5 мкм в зависимости от режимов синтеза (Рис. 1).

Анализ спектров люминесценции показал, что порошки с гексагональной структурой, а также порошки сBN из микронного hBN и борана аммония имеют только сильное фоновое свечение. Люминесцентный центр (Рис. 2, спектр 2) был обнаружен в сильно легированном кубическом нитриде бора, полученном из смеси бора с C_3N_4 [2]. Положение максимума пика соответствует ≈ 680 нм, но он уширен из-за высоких напряжений в решетке, поскольку часть атомов бора и азота замещена углеродом. Центр люминесценции с узкой линией и положением максимума на 683 нм найден в субмикронных кристаллах сBN, полученных из наноразмерного hBN (Рис. 2, спектр 1). Природа этого оптического центра устанавливается.

Работа выполнена в рамках программы Министерства науки и высшего образования РФ FFUW-2021-0003.

1. V. P. Filonenko. Inorg. Mat.: Appl. Res. 2017, 8, 4, 551–555.
2. V.P. Filonenko. Diam. Relat. Mater. 2010, 19, 541–544.

МАГНИТОТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА Bi_2Se_3 , ОБЛУЧЕННЫХ ИОНАМИ АРГОНА

Фоминых Б.М.¹, Перевалова А.Н.¹, Степанов А.Е.¹, Наумов С.В.¹,
Шаломов К.В.², Гущина Н.В.², Марченков В.В.¹

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского
отделения РАН

²Институт электрофизики Уральского отделения РАН
bogdan.fominyh@mail.ru

Известно, что в действительности такие топологические изоляторы, как Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 , несмотря на свое название, изоляторами в объеме не являются. К этому приводят различные дефекты, возникающие в результате синтеза монокристаллов. Как следствие это приводит к определенной трудности исследования транспортных свойств поверхностных состояний таких материалов из-за большого вклада от объемной проводимости. Возникает естественный вопрос: «Возможно ли каким-нибудь образом сместить уровень Ферми так, чтобы он лежал в энергетической щели объемных состояний?». Оказывается, что одним из эффективных способов это сделать является облучение таких материалов различными заряженными частицами. На данный момент имеется достаточно большое количество работ, посвященных исследованию транспортных свойств топологических изоляторов после облучения электронами. Однако подобных работ, где исследуются такие материалы, облученные ионами, достаточно мало (см. обзор [1] и ссылки в нем). Цель данной работы – исследование магнитотранспортных свойств топологического изолятора Bi_2Se_3 после облучения ионами аргона различных флюенсов и энергий.

Монокристалл Bi_2Se_3 был синтезирован методом Бриджмена-Стокбаргера. Было установлено, что монокристалл кристаллизовался в ромбоздрическую структуру с пространственной группой R-3m и параметрами решетки $a = 4.134 \text{ \AA}$ и $c = 28.68 \text{ \AA}$. Анализ химического состава был проведен в центре коллективного пользования ИФМ УрО РАН с помощью сканирующего электронного микроскопа TESCAN MIRA с приставкой EDAX. Из монокристалла методом скола было приготовлено 4 образца, один из которых остался необлученным, а другие подверглись облучению ионами аргона флюенсами $1.25 \cdot 10^{15}$ - 10^{17} см^{-2} и энергиями 10-15 кЭв. Магнитотранспортные свойства

измерены стандартной 4-х контактной методикой в диапазоне температур от 4.2 до 300 К и в магнитных полях до 9 Тл на универсальной установке для измерения физических свойств PPMS-9.

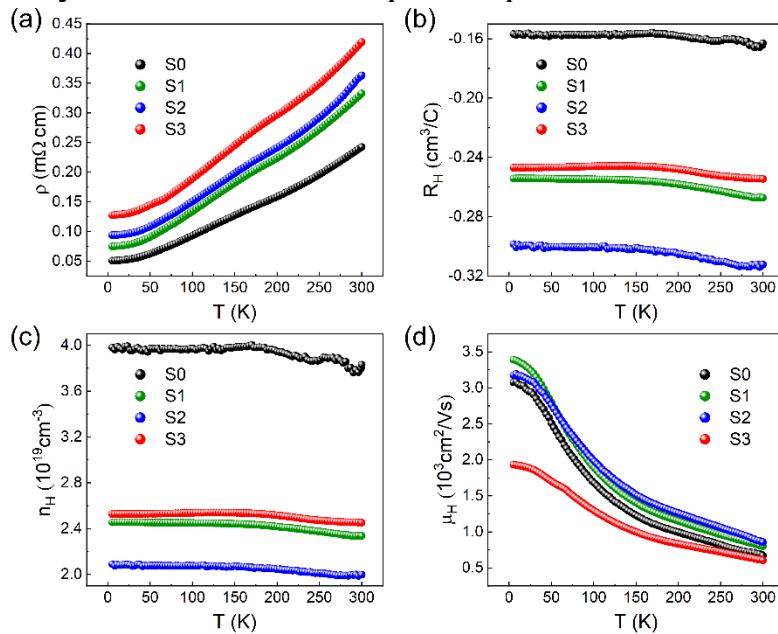


Рис.1. Температурные зависимости электросопротивления (а), сопротивления Холла (б), концентрации (с) и подвижности носителей тока (д) необлученного (S0) и облученных (S1, S2, S3) ионами аргона образцов топологического изолятора Bi_2Se_3 .

В ходе работы были получены экспериментальные зависимости электросопротивления, магнитосопротивления и сопротивления Холла образцов Bi_2Se_3 до и после облучения ионами аргона. Определены параметры электронной структуры и электронного транспорта из эффекта Холла и эффекта Шубникова-де Гааза. Было обнаружено, что облучение приводит к росту электросопротивления, уменьшению концентрации электронов и площади сечения поверхности Ферми (см рис. 1). Анализ фазы Берри показал, что наблюдаемые осцилляции магнитосопротивления могут быть обусловлены как объемными, так и поверхностными носителями тока.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Спин» № 122021000036-3). Б.М. Фоминых благодарит Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН за поддержку работы по государственному заданию Минобрнауки РФ по теме «Спин», которая выполнялась в рамках молодежного проекта ИФМ УрО РАН № м 24-23.

Литература

1. Abhirami S., Amaladass E. P., Amirthapandian S., David C., Mani, A. Phys. Chem. Chem. Phys., 2024

ТРИМЕРНОЕ, ОРБИТАЛЬНОЕ И ЗАРЯДОВОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ФАЗЕ МАГНЕТИТА

Фоминых Н.А.^{1,2}, Стегайлов В.В.^{1,2}

¹*Объединенный институт высоких температур РАН*

²*Московский Физико-Технический Институт (НИУ)*

fominykh.na@phystech.edu

На протяжении многих десятилетий исследования магнетита Fe_3O_4 привлекают большое внимание. Его сложная кристаллическая и электронная структура в сочетании с сильными электронными корреляциями приводит к таким сложным эффектам, как переход Вервея, зарядовое и орбитальное упорядочения.

Основываясь на экспериментальных структурных данных [1] и предыдущем успешном описании зарядового и орбитального упорядочения в высокотемпературной фазе магнетита [2] и хромита [3] была построена первопринципная модель в рамках теории DFT+U. На основе расчетов было рассмотрены совместно зарядовое, орбитальное и тримерное упорядочения в низкотемпературной фазе магнетита. Было получено основное состояние, согласованное с имеющимися экспериментальными данными, кроме этого, было показано, что другие варианты упорядочения достаточно близки по энергии и, вероятно, оказывают значительное влияние при конечных температурах. Также в данной работе будет показана возможность качественного изменения зонной структуры за счет орбитального упорядочения при неизменном зарядовом упорядочении и взаимосвязь наблюданной на эксперименте ширины запрещенной зоны с полярным транспортом.

Литература

1. M. S. Senn, J. P. Wright, J. P. Attfield, *Nature*, **481 (7380)**, 173-176, **2012**
2. M. I. Shutikova, V. V. Stegailov, *J. Phys. Condens. Matter.*, **34 (47)**, 475701, **2022**
3. Н. А. Фоминых, В. В. Стегайлов, *Письма в ЖЭТФ*, **117 (11)**, 857, **2023**

ПРОБЛЕМА УЧЕТА СПИНОВЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ В МАШИННО-ОБУЧАЕМЫХ МЕЖЧАСТИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛАХ: ПРИМЕР СИСТЕМЫ Fe-Cr-C

Е.О. Хазиева¹, Н.М. Щелкачев², Р.Е. Рыльцев¹

¹ Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

² Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН,

Москва, Россия

cat.hazieva@yandex.ru

Межчастичные потенциалы машинного обучения (MLIPs – Machine Learning Interatomic Potentials) – это новый класс силовых полей для атомистического моделирования. Основная идея такого подхода – аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью некоторой многочастичной функции общего вида (например, нейронной сети) используя эталонные значения, полученные с помощью *ab initio* расчетов. Полученный потенциал затем используется в рамках классического атомистического моделирования что позволяет достичнуть *ab initio* точности при меньших на порядки меньших вычислительных затратах [1]. В последние годы было показано, что MLIPs на основе нейронных сетей являются эффективным инструментом для расчета теплофизических свойств металлических сплавов [1-5]. Несмотря на впечатляющие успехи, в данной области имеется множество нерешенных проблем, одной из которых является проблема разработки MLIPs для магнитных систем. Действительно, для корректного моделирования таких систем, вообще говоря, требуется корректно учитывать температурно-индуцированные спиновые флуктуации в DFT расчетах, а также научиться корректно имплементировать спиновые степени свободы в классическое силовое поле. В настоящее время методы решения указанных проблем находятся еще на стадии активной разработки.

В этой связи актуальной задачей является тестирование точности стандартных схем DFT+ML для моделирования магнитных систем. В данной работе представлены результаты такого тестирования для системы Fe-Cr-C, которая играет важнейшую роль в металлургии как основа для конструкционных нержавеющих сталей. С фундаментальной точки зрения эта система интересна наличием сложных химических взаимодействий между переходными металлами и углеродом, а также выраженными магнитными свойствами железа и хрома.

Для разработки потенциалов глубокого обучения (DP – Deep Potentials) мы используем пакет DeePMD-kit [5], в котором в качестве регрессионной модели используется многослойные нейронные сети прямого распространения. Тренировка (параметризация) потенциала производилась в рамках идеологии активного обучения (AL – active learning) в пакете DPGEN [5] с помощью набора неупорядоченных конфигураций (расплавов и переохлажденных жидкостей) во всем диапазоне составов. Эталонные значения энергий и сил вычислялись методом функционала электронной плотности с использованием пакета VASP. Были разработаны две версии потенциала: DP-NM и DP-M, полученные на основе спин неполяризованных и спин поляризованных *ab initio* расчетов, соответственно. Полученные потенциалы были верифицированы путем сравнения результатов атомистического моделирования, *ab initio* расчетов и эксперимента для широкого спектра теплофизических и транспортных свойств системы Fe-Cr-C. Обнаружено, что DP-NM очень хорошо такие свойства как вязкость и температуры плавления, но при этом дает большую ошибку при расчете плотности. Напротив, DP-M прекрасно описывает плотность и структурные характеристики, но существенно занижает значения вязкости. Полученные результаты показывают важность корректного учета спиновых степеней свободы при атомистическом моделировании сплавов на основе железа и хрома.

Список литературы

1. Y. Mishin, Acta Mater. 2021, 214, c.116980.
2. N. Kondratyuk, R. Ryltsev, V. Ankudinov, N. Chtchelkatchev, J. Mol. Liq. 2023, 380, c.121751.
3. A.O. Tipeev, R.E. Ryltsev, N.M. Chtchelkatchev, S. Ramprakash, E.D. Zanotto, J. Mol. Liq. 2023, 387, c.122606.
4. E.O. Хазиева, Н.М. Щелкачев, А.О. Типеев, Р.Е. Рыльцев, ЖЭТФ, 2023, 164, с.980.
5. Wen, T., Zhang, L., Wang, H., Weinan, E., Srolovitz, D. J. Materials Futures, 2022, 1, c.022601.

МОДЕЛИ ТЕРМОДИНАМИКИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ДЕЙСТВИИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ

Хищенко К. В.

Объединенный институт высоких температур РАН

konst@ihed.ras.ru

Для задач моделирования процессов в твердых телах в условиях интенсивного импульсного воздействия специфично варьирование термодинамических параметров состояния материала в обширной области. Вклад большого количества теплоты и совершение работы над твердым телом ведут к росту внутренней энергии и давления в материале, к возможным фазовым превращениям. Адиабатическая разгрузка вещества сопровождается уменьшением температуры и давления, а также появлением возможности образования новых фаз, как и реализации метастабильных состояний.

Описание реакции твердых тел на импульсное действие высоких давлений путем решения системы уравнений движения требует знания уравнения состояния вещества во всем реализуемом в задаче диапазоне термодинамических параметров.

В настоящей работе проводится краткий обзор методов описания термодинамики различных материалов при высоких давлениях и температурах. Приводятся примеры построения уравнений состояния для простых веществ и химических соединений. Демонстрируются результаты расчетов термодинамических характеристик кобальта, никеля, метана, других материалов в сравнении с данными опытов с волнами ударного сжатия и изоэнтропического расширения. Хорошее согласие расчетных кривых с опытными точками позволяет сделать вывод об адекватности рассматриваемых моделей термодинамики в исследованной области.

Представленные уравнения состояния могут быть использованы для решения задач физики твердого тела при импульсном действии высоких давлений.

ЭЛЕКТРОННАЯ ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В СОЕДИНЕНИИ С ВОЛНОЙ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ И НЕИДЕАЛЬНЫМ НЕСТИНГОМ

Цветкова А. В.¹, Родионов Я. И.², Григорьев П. Д.³

¹ НИТУ «МИСИС», Москва, Россия

² Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,
Москва, Россия

³ Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН,

Черноголовка, Россия

al.v.tsvetkova@yandex.ru

Эффектом Пайерлса называется неустойчивость электрон-фононной системы, в результате которой возникает волна зарядовой плотности (ВЗП). Как следствие, в спектре электронов открывается щель, понижая свободную энергию системы. Существуют квазидвумерные соединения, в которых формируется несоизмеримая ВЗП с вектором нестинга Q [1, 2]. Интересно рассмотреть случай неидеального нестинга: когда участки поверхности Ферми при параллельном переносе на вектор Q накладываются друг на друга лишь приблизительно. При этом условии проводимость соединения сохраняется, поэтому необходимо выяснить, каким образом неидеальность влияет на плотность электронных состояний. Величина нарушения нестинга определяется так называемым антинестинговым членом в законе дисперсии электронов, полученным в приближении сильной связи. Наш анализ плотности состояний обобщает и уточняет выводы предыдущей работы [2]. Полученные результаты применимы для тех случаев, когда величина порядка нарушения нестинга может быть любой по отношению к величине порядка параметра щели. Мы показали, что плотность электронных состояний имеет две особенности: при энергии, близкой к сумме щелевого и антинестингового параметров, плотность состояний имеет логарифмическую расходимость; при значении энергии, близкой к разности этих параметров, плотность состояний имеет разрыв первого рода.

Известно, что в некоторых высокотемпературных сверхпроводниках сверхпроводимость и ВЗП существуют и оказывают влияние друг на друга. При определении температуры перехода T_c в теории БКШ допускается, что плотность состояний является константой [3]. Так как плотность состояний в данной ситуации нельзя считать таковой, температура сверхпроводника T_c

изменится. Мы провели расчет для T_c с учетом влияния ВЗП. Было показано, что присутствие антинестингового члена приводит к перенормировке предэкспоненты в стандартной формуле БКШ. А именно, обычная константа (порядка дебаевской частоты), играющая роль предэкспоненты, получает дополнительный степенной множитель в виде отношения частоты Дебая к разности антинестингового и щелевого параметров. Степень этого множителя является отношением скачка плотности состояний в точке разрыва первого рода к значению плотности состояний при нулевой энергии. Полученные результаты применимы к системам сверхпроводников, в которых формируется ВЗП, такие как высокотемпературные купраты, органические сверхпроводники и другие соединения [5].

Работа выполнена в рамках программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" (грант НИТУ "МИСИС" № К2-2022-025), и поддержана грантом 22-1-1-24-1 Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Литература

1. A. A. Sinchenko, P. D. Grigoriev, P. Lejay, and P. Monceau. Phys. Rev. Lett., 112:036601 (2014).
2. Brouet V. et al. Phys. Rev. B 77, 235104 (2008).
3. Grigoriev P. D. Phys. Rev. B 77, 224508 (2008).
4. Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R. Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
5. Gabovich A. M. et al. 14, C. R1 (2001).

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА MnTe

Чернов Е. Д.¹, Лукоянов А. В.^{1,2}

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
chernov_ed@imp.uran.ru

Халькогениды переходных металлов имеют потенциал применения в качестве полупроводников с широкой запрещенной зоной, суперконденсаторов, в каталитических и термоэлектрических устройствах и т.д. В частности, особым интересом обладают

халькогениды марганца MnX ($X = S, Se, Te$). Недавние исследования показало, что в MnS и $MnSe$ в условиях приложенного давления происходит переход из кубической фазы каменной соли в орторомбическую $B31$ структуру с коллапсом объема элементарной ячейки [1]. Поэтому представляет интерес моделирование свойств соединения $MnTe$ с учетом изменения объема ячейки при приложенном давлении. Известно, что $MnTe$ является магнитным полупроводником с непрямой щелью 1.27 – 1.46 эВ и магнитным упорядочением ниже температуры Нееля $T_N = 310$ К [2]. В настоящей работе представлены результаты первоначального моделирования электронной структуры и магнитных свойств теллурида марганца $MnTe$ в рамках методов DFT и DFT+U при нормальных условиях, а также в условиях все стороннего сжатия элементарной ячейки. Выявлена зависимость величины магнитных моментов и ширины запрещенной зоны от величины U параметра и объема элементарной ячейки. А также продемонстрирован переход диэлектрик-металл для гексагональной $P6_3/mmc$ фазы $MnTe$.

Е.Д. Чернов благодарит Институт физики металлов имени М. Н. Михеева за поддержку его работы по государственному заданию Минобрнауки России по теме "Электрон", которая выполнялась в рамках проекта ИФМ УрО РАН № 10-23/мол.

Литература

1. G. Xiao, et al., J. Am. Chem. Soc., **137**, 10297, **2015**.
2. D. Kriegner, et al., Nat. Commun., **7**, 11623, **2016**.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРНАРНЫХ ОКСИДОВ СИСТЕМЫ U-MO-O ПРИ ПОМОЩИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДОВ И DFT-РАСЧЕТОВ

Чичеватов Г.Д.^{1,2}, Артоболевский С.В.^{2,3}, Подрезова Л.Н.³

¹*Объединенный институт высоких температур РАН*

²*Московский физико-технический институт*

³*АО «ВНИИНМ им. А.А. Бочвара»*

chichevativ.gd@phystech.edu, SVArtobolevsky@bochvar.ru

Интерес к тернарным оксидам U-Mo-O обусловлен как широким кристаллохимическим разнообразием образующихся фаз, так и их ролью в геохимических процессах и радиохимической технологии [1].

Установлено [2] присутствие U-Мо-содержащих соединений в зонах месторождений полиметаллических руд и пунктов геологического захоронения радиоактивных отходов; молибдат уранила $U^{VI}O_2Mo^{VI}O_4$ в настоящее время рассматривается как основной продукт кристаллизации в перспективной пирохимической технологии переработки облученного ядерного топлива в молибдатном расплаве [3].

Сложность и дороговизна прецизионных экспериментов по исследованию многокомпонентных оксидных систем на базе U-Мо-О требуют привлечения альтернативных методов, например, расчетов с помощью теории функционала плотности (DFT). Целью настоящей работы стала оценка применимости метода DFT+U(+SOC) [4] к исследованию указанного класса оксидов на примере UO_2MoO_4 с последующей верификацией по экспериментальным данным.

UO_2MoO_4 получали методом твердофазного синтеза спеканием порошков UO_2 и MoO_3 при температуре 750°C в течение 4 часов. Фазовая однородность полученных соединений подтверждалась методом рентгенофазового анализа при помощи порошкового дифрактометра *Colibri* с использованием $CuK\alpha$ – излучения. Коэффициент R_λ измерен методом спектроскопии диффузного отражения, ширина запрещенной зоны оценена построением Тауца.

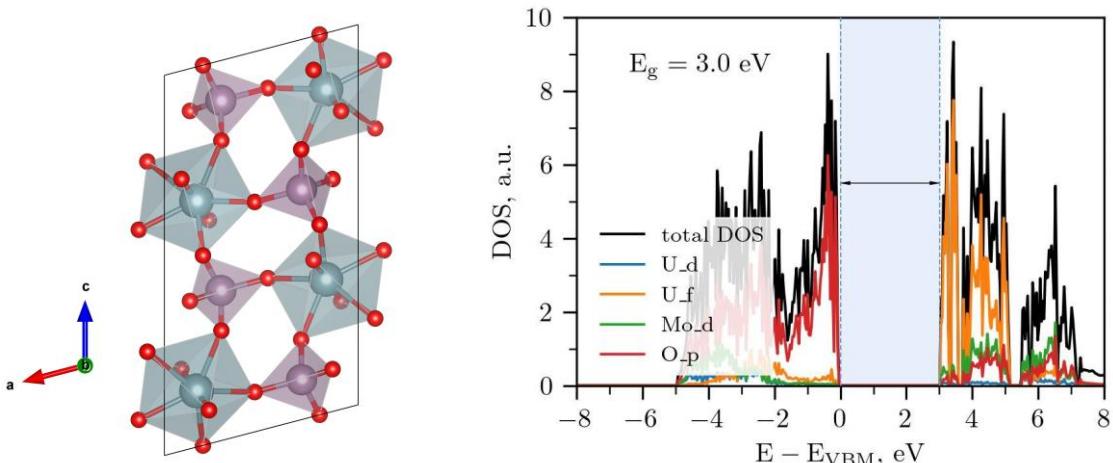


Рисунок 1. Элементарная ячейка и плотность электронных состояний (DOS) UO_2MoO_4

Расчеты выполнялись в программном пакете VASP [5-7] в базисе присоединенных плоских волн с PAW-псевдопотенциалами [8]. Тесты на сходимость и перебор функционалов и параметров кулоновского взаимодействия U_{eff} для описания сильных электронных корреляций на основании лучшего воспроизведения структуры PCA (Рис. 1) [9] (макс.

отклонение параметра решетки 4%, угла – менее 0.1%, отн. изменение межатомного расстояния – менее 10%) определили следующие параметры для дальнейших расчетов:

1. функционал PBEsol GGA [10], воспроизведший РСА-структуре на уровне более ресурсозатратного meta-GGA SCAN;
2. $U_{\text{eff}} = 4.5$ эВ для f-орбиталей атомов урана, на 0.5 эВ больше, чем в работе [11]; для атомов Mo поправка не вводилась;
3. Г-центрированная k-сетка 6x8x3, энергия обрезки 650 эВ;
4. учет дисперсионной поправки D3 [12].

Заряды по Бейдеру найдены равными 3.1 для U, 2.6 для Mo, 1.0 и 0.8-0.9 для двух типов атомов O. Ширина запрещенной зоны составила 3.0 эВ (см. Рис. 1). Значения выше находятся в хорошем согласии с работой [11] с учетом использованного там $U(\text{Mo}) = 4$ эВ.

Литература

1. О.А. Устинов, Атомная энергия, **82**, 2, **1997**.
2. P.C. Burns, Can. Mineral., **35**, 6, **1997**.
3. А.Ю. Шадрин, ВАНТ, **87**, 4, **2016**.
4. S. L. Dudarev et al., Phys. Rev. B, **57**, 3, **1998**.
5. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B, **49**, 20, **1994**.
6. G. Kresse, J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci., **6**, 1, **1996**.
7. G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B, **54**, 16, **1996**.
8. P. E. Blöchl, Phys. Rev. B, **50**, 24, **1994**.
9. В.Н. Серёжкин, Кристаллография, **17**, 6, **1972**.
10. J. P. Perdew et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 13, **2008**.
11. B. Ao, J. Phys. Chem. C, **123**, 49, **2019**.
12. S. Grimme et al., J. Comput. Chem., **32**, 7, **2011**.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В Fe_3O_4 И FeCr_2O_4 С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА DFT+U В КОНТЕКСТЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Чичеватов Г. Д.^{1,2}, Стегайлов В. В.^{1,2}

¹Объединенный институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (НИУ)

chichevativ.gd@phystech.edu

Построение теоретических моделей коррозии сталей в контакте с кислородсодержащим свинцовым теплоносителем тесно сопряжено с

исследованием дефектных и транспортных свойств магнетита Fe_3O_4 и железохромистых шпинелей $(Fe_xCr_{1-x})_3O_4$ [1]. Известно, что во многих экспериментах эти оксиды образуют на поверхности стали двуслойную защитную оксидную пленку, где внешний слой – магнетит [2].

Методы первопринципного атомистического моделирования применительно к описанию термодинамики и транспорта дефектов в Fe_3O_4 в последнее время зарекомендовали себя как ценный инструмент для построения дефектной картины на микроуровне [3-5]. С другой стороны, существует большой объем уникальных экспериментальных результатов Дикманна и соавторов (см. напр. [6,7]) по исследованию точечных дефектов в катионной подрешетке Fe_3O_4 . Их данные могут быть в принципе получены в расчетах с помощью теории функционала плотности (DFT) и тем самым послужить хорошей валидацией используемых приближений DFT для распространения их на смешанные шпинели $(Fe_xCr_{1-x})_3O_4$, гораздо более скучно изученные на предмет дефектных и транспортных свойств как в экспериментах, так и теоретически.

Основная часть настоящей работы представляет собой расчет энергий образования всевозможных точечных дефектов (катионных и анионных) в кубических фазах шпинелей Fe_3O_4 и $FeCr_2O_4$ как наиболее простых моделях внутреннего и внешнего защитных оксидных слоев. Метод DFT+U [8] с параметрами $U = 3.5$ и 2.0 эВ для Fe и Cr, соответственно, применялся для учета сильных корреляций 3d-электронов. Влияние температуры и парциального давления кислорода было косвенно учтено при рассмотрении границ изменения химических потенциалов атомов. Впервые произведенное сравнение двух сходных кристаллических структур показало, что благодаря более высокой экранирующей способности системы ионов железа смешанной валентности [6] магнетит склонен к образованию нейтральных дефектов в гораздо большей степени, тогда как в хромите локализация высвобождающихся при образовании дефекта носителей на атомах переходных металлов даже не всегда выгодна. Наименьшая из рассчитанных энергий образования френкелевской пары железа в Fe_3O_4 1.21 эВ близка к экспериментальному значению 1.38 эВ [6].

Кроме того, в нашей работе было обнаружено, что образование В-междоузлия в Fe_3O_4 сопровождается в расчете образованием френкелевской пары из А-вакансии и В-междоузлия, что косвенно подтверждает результат XAS Elnaggar и др. по катионному беспорядку в стехиометрическом Fe_3O_4 [9]. Поэтому дополнительно нами были

проделаны расчеты энергий образования *связанных* пар Френкеля в магнетите.

Литература

1. D. A. Kolotinskii et al., Corros. Sci., **211**, 2023.
2. J. Zhang and N. Li, Oxid. Met., **63**, 5, 2005.
3. M. I. Shutikova and V. V. Stegailov, J. Phys. Condens. Matter., **34**, 47, 2022.
4. S. Srivastava et al., J. Phys. Chem. C, **127**, 35, 2023.
5. C. L. Muhich et al., Chem. Mater., **28**, 1, 2016.
6. R. Dieckmann, Ber. Bunsenges. Phys. Chem., **86**, 2, 1982.
7. R. Dieckmann and H. Schmalzried, Ber. Bunsenges. Phys. Chem., **90**, 7, 1986.
8. S. L. Dudarev et al., Phys. Rev. B, **57**, 3, 1998.
9. H. Elnaggar et al., Phys. Rev. Lett., **127**, 2021.
10. Г. Д. Чичеватов, В. В. Стегайлов, ЖЭТФ, **166**, 9, 2024 (принята к публикации).

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АЛМАЗОВ, ВЫРАЩЕННЫХ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НИКЕЛЯ

Шахов Ф.М., Осипов В.Ю., Попов В.В., Трофимук А.Д.

ФТИ им. А.Ф. Иоффе

Fed800@gmail.com

При высоком давлении 5 ГПа и температуре 1650°C методом спонтанной кристаллизации из графита с никелем ($4s^23d^8$) синтезированы алмазные шлифпорошки с размером зерна 40–200 мкм марки АС6 по ГОСТ 9206-80. Для уменьшения концентрации азотных центров в алмазах (N_{P1} , N_A , N_{C+}) в исходную ростовую смесь графита с никелем был добавлен алюминий (9 вес%) [1]. В результате общая концентрация азотных центров снизилась с 200–450 ppm до 100–200 ppm [1]. Для создания 4f-люминесцентных центров в ростовую среду добавлялся оксид европия в количестве 5 вес%.

Показано, что в синтезированных порошках никель содержится в форме суперпарамагнитных наночастиц с размером 7–15 нм. При добавлении алюминия концентрация никеля в алмазах в форме таких частиц снижается с 1760 до 270 ppm [2]. Концентрация отрицательно-заряженного никеля в форме атомов замещения Ni_s^- со спином $S = 3/2$,

с электронной конфигурацией $3d^7$ (W8 центр) снижается с 6.5 ppm до 2.2 ppm [3].

В синтезированном материале с большой концентрацией азота и никеля можно выделить до 5–6 групп частиц с различными эмиссионными центрами. При оптическом возбуждении на длинах волн 532 или 633 нм видны частицы со спектрами только от NiV^- центров (группа 1), с эмиссионными линиями 615, 621 нм от ионов Eu^{3+} и спектром эмиссии от NV^- центров (группа 2), с эмиссионными линиями 602, 618 нм от NiN_x центров и другими характерными линиями (группа 3), а также частицы с характерным уникальным паттерном из шести эмиссионных линий 700.0, 709.9, 721.2, 734.4, 749.9 и 762.2 нм от NiN_x центров и отдельной эмиссионной линией 794.7 нм от NE8 центров (группа 4), с паттерном из эмиссионной линии 746.9 (ZPL), линиями фононных повторений 774.9 и 805.1 nm (1.66 eV-система линий) и эмиссионными линиями 794.8 (ZPL), 812.5, 830.9 nm (фононные повторения 1.56 eV-системы линий) (группа 5) от NiN_x центров [4], и частицы с одиночной высокоинтенсивной линией 883 nm от Ni_s^+ или NiV^- (NE4) центров (группа 6). Упомянутый секстет спектральных линий содержит безфононную линию 721.1 nm и три линии фононных повторений с энергией фона 32 мэВ. Широкие спектральные линии этой группы линий (ZPL 721.1 nm) свидетельствуют о том, что атомы, формирующие этот ранее неизученный оптический центр, находятся в замещающих углерод позициях в кристалле с сильным электрон-фононным взаимодействием.

Исследование выполнено в рамках государственного задания "Функциональные углеродные наноструктурированные материалы" FFUG-2024-0019.

Литература

1. F.M. Shakhov, V.Yu. Osipov, A.A. Krasilin, K. Iizuka, R. Oshima. *J. Solid State Chem.* **307**, 122804, **2022**.
2. F.M. Shakhov, R. Oshima, V.V. Popov. *J. Phys. Chem. Solids.* **185**, 111770, **2024**.
3. V.Yu. Osipov, F.M. Shakhov, N.M. Romanov, K. Takai. *Mendeleev Commun.* **32**, 645–648, **2022**.
4. I.E. Kaliya, V.Y. Osipov, F.M. Shakhov, K. Takai, K.V. Bogdanov, A.V. Baranov. *Carbon.* **219**, 118839, **2024**.

ПОДХОД МАРКОВСКИХ ЦЕПЕЙ ДЛЯ АНАЛИЗА ФРУСТРИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ ОДНОМЕРНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

Ясинская Д. Н.¹, Панов Ю. Д.¹

¹ Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург
daria.iasinskaia@urfu.ru

Одномерные спиновые модели, несмотря на кажущуюся простоту по сравнению с системами больших размерностей, обладают рядом уникальных свойств. Точные решения этих моделей необходимы для понимания поведения реальных физических систем, в частности, при изучении фазовых переходов в статистической физике [1]. Отсутствие дальнего порядка в низкоразмерных спиновых системах ответственно за многие особенности их поведения.

Хотя зачастую допускается существование точного решения, анализ фазовых состояний одномерных систем с использованием стандартного формализма трансфер-матрицы может оказаться сложной задачей, особенно при исследовании состояний на границах между различными фазами. В этом исследовании мы предлагаем новый подход к анализу упорядоченных и фрустрированных фазовых состояний в одномерных спиновых цепочках путем сопоставления их с некоторыми марковскими цепями [2]. В качестве примера мы рассматриваем цепочку изинговских спинов, разбавленную двумя типами взаимодействующих заряженных примесей [3]. Гамильтониан включает в себя локальные и межузельные заряд-зарядовые корреляции, спиновый обмен в форме Изинга, внешнее магнитное поле и химический потенциал для примесей.

Рассматриваемая модель демонстрирует большое разнообразие фаз основного состояния, большинство из них имеют ненулевую остаточную энтропию, что указывает на фрустрацию. В частности, в нулевом магнитном поле каждая фрустрированная фаза соответствует своему типу марковской цепи. Во внешнем поле в системе реализуются только два типа цепей Маркова: периодические с периодом 2 и апериодические. Каждая из этих марковских цепей обладает особыми свойствами и определяет классификацию фаз фрустрированного основного состояния. Используя этот подход, мы можем выяснить структурные особенности фрустрированных фаз, которые не могут

быть легко различимы с помощью традиционных методов трансфер-матрицы.

В фазах, характеризующихся периодическими цепями Маркова, в одной подрешетке проявляется дальнее упорядочение, в то время как другая подрешетка остается неупорядоченной. Это приводит к уникальному сочетанию ненулевой остаточной энтропии и бесконечной корреляционной длины. И наоборот, в фрустрированных фазах с апериодическими цепочками дальний порядок отсутствует и корреляционная длина конечна. Показано, что при включении магнитного поля наиболее значимому изменению структуры спиновой цепочки соответствует изменение типа марковской цепи: апериодическая цепь становится периодической, что означает появление в системе дальнего порядка.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 24-21-20147).

1. R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic, London, 1982).
2. Y. Panov and O. Rojas. *Phys. Rev. E* **108**, 044144, **2023**.
3. Yu. D. Panov et al. *J. Supercond. Nov. Magn.* **29**, 107, **2016**.

ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЙ МЕТОД КРАТЧАЙШИХ ГРАФОВ ДЛЯ АНАЛИЗА ПАРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ЖИДКОСТЯХ

Денисенко И.Р., Насыров А.Д., Юрченко С.О., Крючков Н.П.
МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия
kruchkov_nkt@mail.ru, ilyadenisenko@mail.ru

Парная корреляционная функция $g(r)$ является важной структурной характеристикой конденсированного вещества, необходимой для описания и интерпретации экспериментов и численных расчетов [1, 2]. Хотя проблема расчета $g(r)$ хорошо изучена для неидеальных газов [3] и недавно решена для одноатомных кристаллов с использованием теоретических методов [4], для жидкостей она остается слабо изученной. Такие методы, как интегральные уравнения Орнштейна-Цернике [5] и иерархия Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона [6], требующие сложные замыкающие соотношения, являются вычислительно затратными и

обеспечивают ограниченную точность, особенно вблизи линии плавления. Основной метод расчета $g(r)$ в жидкостях — это молекулярная динамика или метод Монте-Карло, которые требуют значительных вычислительных ресурсов и не предлагают аналитически параметризованных аппроксимаций для $g(r)$.

В данной работе представлен новый метод (FIM), для интерполяции парной корреляционной функции $g(r)$ в жидкости. Разработанный метод преодолевает ограничения, возникающие при использование классических подходов, разлагая $g(r)$ на корреляционные пики, определенные через ячейки Вороного (рис. 1), которые затем нормализуются. Это позволяет точно интерполировать $g(r)$, используя данные моделирования всего из трех различных температурных точек.

Метод был проверен с помощью ряда симуляций МД для различных двумерных жидкких системах: жидкость Леннард-Джонса, жидкость с отталкиванием по обратному степенному закону (IPL), активные жидкости и модельные биологические ткани. Результаты показали высокую точность с относительными ошибками менее 1.5% в $g(r)$, энергии взаимодействия и давлении.

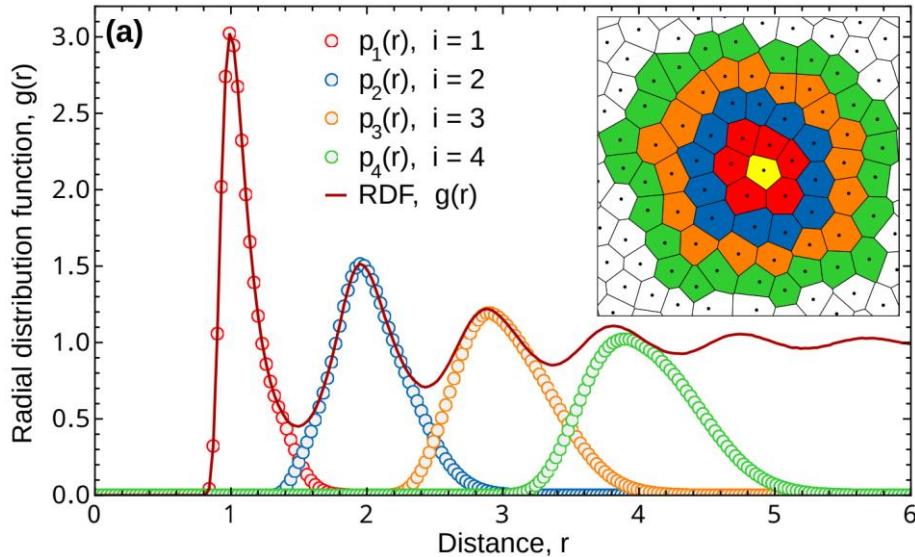


Рис. 1: Разложение $g(r)$ на корреляционные сферы Вороного при $T = 6$. Сплошная линия представляет $g(r)$, тогда как красный, синий, оранжевый и зеленый символы обозначают вклады первой, второй, третьей и четвертой корреляционных сфер соответственно. На вставке показаны сферы мгновенных корреляций, определенные с помощью кратчайших графов и ячеек Вороного

Эффективность и надежность разработанного метода делают его ценным инструментом как для теоретических исследований, так и для

анализа экспериментальных данных, заполняя разрыв между ресурсоемкими симуляциями и упрощенными теоретическими моделями.

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

Литература

1. Terban M. W. et al., *Chem. Rev.*, **122**, 1208, **2021**
2. Niemann T. et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58**, 12887, **2019**
3. Mayer J. E., *J. of Chemical Phys.*, **5**, 67, **1937**
4. Yurchenko S. O. et al., *J. of Chemical Phys.*, **143**, 034506, **2015**
5. Heinen M., *J. of Computational Chem.*, **39**, 1531, **2018**
6. Liboff R. L. et al., *J. of Mathematical Phys.*, **8**, 2001, **1967**

КОЛЛОИДНЫЕ СИСТЕМЫ ВО ВНЕШНИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ: ВЗГЛЯД В ГЛУБИНУ

Широкова А.А., Швецов А.И., Симкин И.В.,
Кохановская А.В., Либет П.А., Яковлев Е.В.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия
shirokova2001@yandex.ru, yakov.egor@gmail.com

В настоящее время набирают популярность методы создания материалов при помощи 3D-печати. Для этих целей используют различные материалы, такие как полимеры [3], керамика [2], смолы [1], а также коллоидные частицы [4,5]. Коллоидными частицами возможно управлять различными способами, в том числе и внешними полями [6]. Однако задача визуализации и управления коллоидной системой в трехмерном пространстве остается нерешенной.

В настоящей работе для изучения динамики системы коллоидных частиц под воздействием внешнего врачающегося магнитного поля. Для этого была разработана экспериментальная система, в которой суспензия подсвечивалась плоскостным лазером. Для генерации магнитного поля использовались 4 катушки в горизонтальной плоскости. В качестве экспериментального образца использовались суперпарамагнитные частицы диоксида кремния, объемно наполненные оксидом железа, в водном растворе глицерина. Для того, чтобы научиться определять положение частицы по координате Z,

были проведены эксперименты с использованием двух камер в разных плоскостях.

Для исследования динамики коллоидных частиц были проведены эксперименты, в которых велось видеонаблюдение за частицами при разных амплитудах магнитного поля. Величина тока на катушках варьировалась от 0,07А до 0,43А. Полученные видео подвергались пост-обработке, в результате которых были восстановлены траектории частиц в трехмерном пространстве (рис. 1) и определен коэффициент диффузии.

В результате работы была разработана экспериментальная установка визуализации коллоидных частиц в трехмерном пространстве и разработан алгоритм для определения координат частиц и их трекинга. Благодаря этому был получен коэффициент диффузии для частиц полистирола в водном растворе глицерина.

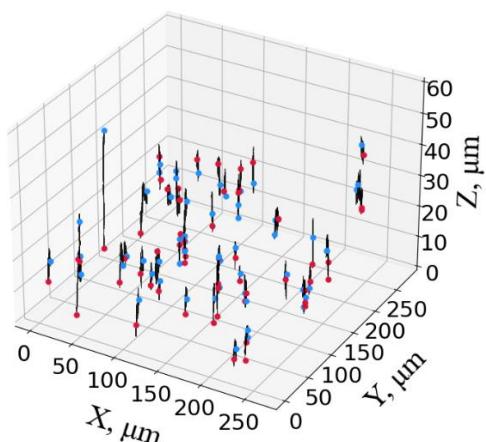


Рис. 1: Трекинг частиц диоксида кремния во внешнем вращающемся магнитном поле.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-72-10128 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Литература

1. Lewicki J. P. et al. Sci. Rep., **7**, 1, 43401, **2017**
2. Chen Z. et al. J. of the Eu. Ceramic Soc., **39**, 4, 661-687, **2019**
3. Gray R. W., et al., R. Prot. J., **4**, 14-25, **1998**
4. Zhu C. et al. Annual Rev. of Chem. and Bio. Eng., **10**, 17-42, **2019**
5. Corker A. et al., Soft Matter., **15**, 6, 1444-1456, **2019**
6. Yakovlev E. V. et al., J. of Coll. and Interface Sci., **608**, 564-574, **2022**

РОЛЬ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЗАДАЧАХ НЕФТЕГАЗОВОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Кондратюк Н.Д.^{1,2,3}, Писарев В.В.^{2,3}

¹*Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет)*

²*Национальный исследовательский университет Высшая школа
экономики*

³*Объединенный институт высоких температур РАН
nidkond@gmail.com*

Прогнозирование физико-химических свойств существующих углеводородных жидкостей, а также поиск новых соединений с необходимыми параметрами, представляют большой промышленный интерес, так как данные соединения лежат в основе смазочных и топливных жидкостей. Важным аспектом для добывающей промышленности являются поверхностные явления. Их характеризует коэффициент поверхностного натяжения флюидов на границе раздела и краевые углы на поверхностях.

В докладе будут продемонстрирована применимость методов атомистического моделирования для расчета уравнений состояния и коэффициентов переноса для жидких углеводородов и растворов органических молекул [1]. Предсказанные без наличия экспериментальных данных коэффициенты вязкости смесей совпадают с опубликованными позднее экспериментальными данными. Показано универсальное соотношение между избыточной энтропией и коэффициентом вязкости.

Для модельных систем (вода-н-додекан и вода-толуол) проведены расчеты поверхностного натяжения в потенциалах с различной степенью детализации. Разработанные методики применяются для уточнения гидродинамических симуляторов течения флюидов сквозь пористую среду.

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

Литература

1. Н.Д. Кондратюк, В.В. Писарев, УФН, **193**, 437–461, **2023**

Научное издание

**XXIII Всероссийская конференция
«Проблемы физики твердого тела и высоких давлений»
20 – 29 сентября 2024 г.**

Тезисы

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

Авторская редакция

Подписано в печать . Формат 60×84 1/16.
П. л. . Тираж 110 экз.

Издательство Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 53