

**XX Всероссийская школа-конференция молодых ученых  
"Проблемы физики твердого тела и высоких давлений"**

**Сочи, пансионат "Буревестник  
16 - 26 сентября 2021г.**

**ТЕЗИСЫ**

**Москва, ФИАН 2021**

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

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

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

© Коллектив авторов, 2021  
© ФИАН, 2021

Всероссийская школа-конференция "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений" проводилась Институтом физики высоких давлений РАН (первоначально Школа-семинар) каждые два года, начиная с 1989 г. Все школы-конференции проходили осенью на базе студенческого лагеря Московского Государственного Университета им. М.В. Ломоносова – пансионата «Буревестник».

С течением времени увеличивалось количество участников конференции, расширялась ее тематика, начиная с 2015 года конференция организуется ежегодно силами Института физики высоких давлений РАН и Физического института РАН. С 2018 года соорганизатором конференции является также МГУ им.М.В.Ломоносова. К настоящему времени было проведено девятнадцать таких Конференций, проводимая в 2021 году Конференция будет 20-й в общем ряду школ-конференций «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений».

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 как можно большего количества молодых ученых и содействие развитию творческой научной активности молодых ученых. Тематика конференции включает многие научные исследования в рамках инициативных научных проектов, поддержанных различными фондами РФ.

Особенностью Школы-конференции является обязательное устное выступление с оригинальными докладами всех молодых участников. Отобранные тезисы докладов публикуются в данном сборнике.

Презентации лекций и оригинальных докладов будут доступны на сайте XX Конференции <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**

- П.И.Арсеев, *чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН)* - председатель
- В.В.Бражкин, *академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)* - заместитель председателя
- А.А.Федянин, *д.ф.-м.н., профессор РАН, проректор МГУ*
- В.Н.Рыжов, *д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)*

## **ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

- П.И.Арсеев, *чл.-корр. РАН д.ф.-м.н., (ФИАН)* - председатель
- В.В.Бражкин, *академик РАН д.ф.-м.н., (ИФВД РАН)*  
- заместитель председателя
- В.Н.Манцевич, *д.ф.-м.н. (МГУ)*
- А.В.Богач, *к.ф.м.н. (ИОФ РАН)*
- В.Е.Анкудинов, *к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)*
- Н.В.Козюлина *(ФИАН)*

# СОДЕРЖАНИЕ

## ЛЕКЦИИ

- Бражкин В.В.** **17**  
ПОЧЕМУ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА «РАБОТАЕТ» В  
КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ?
- Глазов М.М.** **18**  
АНОМАЛЬНЫЙ И КВАНТОВЫЙ ТРАНСПОРТ  
ЭЛЕКТРОНОВ И ЭКСИТОНОВ В ДВУМЕРНЫХ  
ДИРАКОВСКИХ МАТЕРИАЛАХ
- Глушков В.В.** **19**  
АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В МАГНЕТИКАХ С  
НЕТРИВИАЛЬНЫМИ СПИНОВЫМИ СТРУКТУРАМИ
- П.Д. Григорьев, П.А. Воробьев, А.А. Синченко** **21**  
ОСОБЕННОСТИ СОСТОЯНИЯ С ВОЛНОЙ ЗАРЯДОВОЙ  
ПЛОТНОСТИ В ТРИТЕЛЛУРИДАХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ  
МЕТАЛЛОВ
- Капуткина Н.Е., Алтайский М.В.** **23**  
МАССИВЫ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ  
ИНФОРМАЦИИ
- Манцевич В.Н., В.Н. Лучкин, Н.С. Маслова** **24**  
КВАНТОВЫЕ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В  
МНОГОКАНАЛЬНЫХ КОРРЕЛИРОВАННЫХ ТУННЕЛЬНЫХ  
СТРУКТУРАХ
- Маслова Н. С.** **26**  
ФЛУКТУАЦИИ ТОКА ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ ЧЕРЕЗ  
ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ И ПЕРЕПУТАННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ  
СОСТОЯНИЯ С КУЛОНОВСКИМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

<b>Мельников А.С.</b>	<b>27</b>
КОЛЛЕКТИВНЫЕ МОДЫ В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СИСТЕМАХ	
<b><u>Михеенков А.В., Валиулин В.Э., Кугель К.И., Щелкачев Н.М.</u></b>	<b>29</b>
МНОГОЧАСТИЧНАЯ ЗАПУТАННОСТЬ НЕТОЖДЕСТВЕННЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ	
<b>Мокшин А.В.</b>	<b>31</b>
КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА ЧАСТИЦ В ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ЮКАВА-ЖИДКОСТИ	
<b><u>Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В.</u></b>	<b>32</b>
РАЗМЕРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ХАРАКТЕРИСТИКАХ НЕРАВНОВЕСНОГО ПОВЕДЕНИЯ СЛОЖНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ, ОПИСЫВАЕМЫХ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛЬЮ ГЕЙЗЕНБЕРГА	
<b>Стрельцов С.В.</b>	<b>34</b>
ОКСИДЫ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В “АДСКИХ” УСЛОВИЯХ	
<b>Тарасенко С.А.</b>	<b>34</b>
СПИНОВЫЕ ЦЕНТРЫ В КАРБИДЕ КРЕМНИЯ	
<b><u>Щелкачев Н.М., Николаев А.В., Саламатин Д.А., Цвященко А.В.</u></b>	<b>35</b>
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБЪЯСНЕНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ГРАДИЕНТОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В КРИСТАЛЛАХ: ПРИЛОЖЕНИЕ К $Zn_2$ , $Cd$ И $TiO_2$	

## ДОКЛАДЫ

Азаревич А.Н., Богач А.В. , Глушков В.В. , Демишев С.В. ,  
Филипов В.Б., Шицевалова Н.Ю., Габани С., Флахбарт К.,  
Качмарчик Ё., Случанко Н.Е. **39**

ТРЕХМЕРНАЯ МАГНИТНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА  
АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА  $\text{CeV}_6$

Аксенов С. В., Шустин М. С. **41**

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ФАЗЫ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ  
ПРОВОЛОКИ ПРИ УЧЕТЕ СИЛЬНЫХ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ  
ЗАРЯДОВЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ»

Алексеев П.С., Алексеева А.П. **43**

СИЛЬНО ВЯЗКАЯ ДВУМЕРНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ  
ЖИДКОСТЬ В GaAs КВАНТОВЫХ ЯМАХ С ВЫСОКОЙ  
ПОДВИЖНОСТЬЮ

Анкудинов В. Е. **45**

РОСТ КРИСТАЛЛОВ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИНГОНИИ В  
МОДЕЛИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПОЛЯ

Антанович А.А. **46**

СПОСОБ ПРОПИТКИ ГРАФИТА МЕТАЛЛАМИ ПОД  
ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Антропов А.С. , Стегайлов В.В. **48**

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ ГАЗА НА ДИФФУЗИЮ  
ГАЗОНАПОЛНЕННЫХ ПУЗЫРЕЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Баграмов Р.Х. **51**

СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ЯДРО-ОБОЛОЧКА В УСЛОВИЯХ  
ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ

Барсегян А.Т. , Стегайлов В.В. **53**

ПЕРЕХОД ЛЬДА XVII В КУБИЧЕСКИЙ И  
ГЕКСАГОНАЛЬНЫЙ ЛЕД В МОДЕЛИ  $\text{TiP}_4\text{P}/\text{ICE}$

- Билинский Ю.М., Арсеев П.И.** 54  
ОСОБЕННОСТИ МИКРОСКОПИЧЕСКОГО ВЫВОДА  
УРАВНЕНИЯ ГИНЗБУРГА-ЛАНДАУ В НЕСТАЦИОНАРНОМ  
СЛУЧАЕ
- Беккер Т.Б., Сагатов Н.Е., Подбородников И.В.,  
Литасов К.Д.** 56  
ФАЗОВЫЕ СООТНОШЕНИЯ В БОРСОДЕРЖАЩИХ  
СИСТЕМАХ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ
- Васин М.Г., Анкудинов В.Е.** 58  
МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ РАСПЛАВА В  
УСЛОВИЯХ КОНКУРЕНЦИИ ПРОЦЕССОВ  
ФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И  
АМОРФНОЙ СТРУКТУР
- Ведмидь Л.Б., Федорова О.М.** 60  
ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ БАРИЕМ НА  
КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ ПЕРОВСКИТА  $GdMnO_3$
- Волкова З.Н., Верховский С.В., Геращенко А.П., Михалев К.** 61  
БЛИЖНИЙ МАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В ПАРАМАГНИТНОЙ  
ФАЗЕ КУБИЧЕСКОГО ПЕРОВСКИТА  $SrMnO_{3-x}$  ( $x < 0.005$ ) ПО  
ДАНЫМ ЯМР  $^{17}O$  И  $^{87}Sr$
- Волосников Д.В., Поволоцкий И.И., Васин М.Г., Скрипов П.В.** 62  
СПИНОДАЛЬНЫЙ РАСПАД ВОДНЫХ РАСТВОРОВ  
ГЛИКОЛЕЙ ПРИ НАЛИЧИИ ЗАМКНУТОЙ ОБЛАСТИ  
НЕСОВМЕСТИМОСТИ
- Галимзянов Б.Н., Доронина М.А., Мокшин А.В.** 65  
МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ  
ОБЪЕМНОГО МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА  $Ni_{62}Nb_{38}$  ПРИ  
СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ
- Гамзатов А.Г., Алиев А.М., Гаджиев А.Б., Qiao K., Hu F.** 66  
ДЕГРАДАЦИЯ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В  
СПЛАВЕ  $Fe_{50}Rh_{50}$  ПРИ ДОЛГОВРЕМЕННОМ  
ВОЗДЕЙСТВИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ ДО  
8 Тл



- Гаркуль А.А. , Стегайлов В.В. 68  
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПЕРЕХОДА МЕЖДУ АМОРФНЫМИ ФАЗАМИ ЛЬДА И  
РАСЧЕТ ИХ УПРУГИХ СВОЙСТВ**
- Гудин С.А. , Гамзатов А.Г..,Арсланов Т.Р 70  
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ  
ГРАНУЛИРОВАННОЙ КЕРАМИКИ  $\text{La}_{0.8}\text{Ag}_{0.1}\text{MnO}_3$  ПРИ  
ПРИЛОЖЕНИИ ДАВЛЕНИЯ ДО 8,5 ГПа**
- Гудина С.В. , Неверов В.Н. , Попов М.Р. Шелушнина Н. Г. ,  
Якунин М.В. , Дворецкий С. А. , Михайлов Н. Н. 72  
СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ РАШБЫ В  
КВАНТОВЫХ ЯМАХ НА ОСНОВЕ ТЕЛЛУРИДА РТУТИ С  
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ ВБЛИЗИ ТОЧКИ  
ИНВЕРСИИ ЗОН**
- Ключанцев А.Б., Дзедзисашвили Д.М. 74  
КВАНТОВЫЙ ТРАНСПОРТ ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ СИСТЕМЫ  
АТОМНОГО МАСШТАБА**
- Дмитрюк Н.А., Мистрюкова Л.А., Крючков Н.П., Юрченко С.О.  
ИССЛЕДОВАНИЕ ПОДВИЖНОСТИ НА БИНОДАЛИ  
ЖИДКОСТЬ-ГАЗ ДЛЯ СИСТЕМ С РАЗЛИЧНЫМ  
ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕМ ПРИТЯЖЕНИЯ 76**
- Ефимченко В.С., Мелетов К.П., Короткова М.А. 78  
ТЕРМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ  
РАСТВОРОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА В  
СИЛИКАТНЫХ СТЕКЛАХ**
- Зибров И.П., Филоненко В.П., Краснорусский В.Н. 80  
БОРИРОВАННЫЙ АЛМАЗ: НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ**
- Камаева Л.В. , Рыльцев Р.Е. , Щелкачев Н.М. 83  
ВЯЗКОСТЬ РАСПЛАВОВ Al-Cu-Co**

- Кешарпу К.К. , Григорьев П.Д. 84**  
 АНАЛИЗ ФОРМЫ И РАЗМЕРОВ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ  
 ДОМЕНОВ В СИЛЬНО АНИЗОТРОПНЫХ  
 СВЕРХПРОВОДНИКАХ
- Комлева Е.В. 85**  
 РАЗЛИЧНЫЕ КАРТИНЫ ОПИСАНИЯ КЛАСТЕРОВ  
 ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ПРИМЕРЕ СЕРИИ  
 $Ba_4NbTM_3O_{12}$  (TM=Mn, Rh, Ir)
- Кондратюк Н.Д. , Писарев В.В. 86**  
 ИЗМЕНЕНИЕ СВОЙСТВ СМАЗОЧНЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПРИ  
 ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ
- Копасов А. А., Мельников А. С. 88**  
 ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТОВ ГИБРИДИЗАЦИИ НА  
 КРИТИЧЕСКУЮ ТЕМПЕРАТУРУ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО  
 ПЕРЕХОДА В МАЙОРАНОВСКИХ НАНОПРОВОДАХ
- Коплак О.В., Куницына Е.И., Дремова Н.Н, Гапанович М.В.,  
 Моргунов Р.Б. 90**  
 ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МИКРОМАГНИТОВ НА  
 ОСНОВЕ  $FeCoPrDyB$
- Короткова М.А., Ефимченко В.С., Мелетов К.П. 92**  
 ВОДОРОД В МЕЗОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ОПАЛАХ
- Корсакова С.А., Крючков Н.П., Яковлев Е.В., Быстров Д.А.,  
 Юрченко С.О. 94**  
 ДИНАМИКА АНИЗОТРОПНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ  
 ВРАЩАЮЩИХСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ
- Красиков К.М. , Глушков В.В. , Демишев С.В. , Богач А.В. ,  
 Шицевалова Н.Ю., Филипов В.Б., Случанко Н.Е. 96**  
 АНИЗОТРОПИЯ РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ В  
 АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ  $HoB_{12}$  и  $ErB_{12}$
- Краснорусский В. Н., Нарожный В. Н. 98**  
 РЕОРИЕНТАЦИЯ МАГНИТНЫХ ГЕЛИКОИДОВ  $MnSi$  В  
 МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**Крючков Н.П., Юрченко С.О. 100**  
КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В АКТИВНЫХ  
ЖИДКОСТЯХ: МИКРОПОТОКИ И НАРУШЕНИЕ  
СПЕКТРАЛЬНОГО РАВНОРАСПРЕДЕЛЕНИЯ  
КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ

**Борик М.А., Кораблёва Г.М., Кулебякин А.В., Курицына И.Е. ,  
Ломонова Е.Е., Мызина В.А., Табачкова Н.Ю., Числов А.С. 102**  
СТРУКТУРА И ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ  
ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА  
ЦИРКОНИЯ

**Кулебякина Е.В., Скориков М.Л., Колобкова Е.В., Белых В.В. 103**  
ДИНАМИКА ЭКСИТОНОВ В НАНОКРИСТАЛЛАХ  
ПЕРОВСКитОВ

**Либет П. А., Яковлев Е.В., Юрченко С.О. 104**  
КОНЦЕПТ УПРАВЛЯЕМОЙ САМОСБОРКИ МЯГКОЙ  
МАТЕРИИ В ПРОСТРАНСТВЕННО ЛОКАЛИЗОВАННЫХ  
ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И СВЕТОВЫХ ПОЛЯХ

**Литасов К. Д., Степанов К. М., Менлембетов А. Р.,  
Филоненко В. П., Шацкий А. Ф. 106**  
СИНТЕТИЧЕСКИЙ АЛМАЗ «КАРБОНАДО» И  
МИКРОАЛМАЗЫ ИЗ МЕТЕОРИТОВ

**Литасов К. Д., Каги Х., Хирата Т. 108**  
МИКРОЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВ И МИКРОВКЛЮЧЕНИЯ В  
СИНТЕТИЧЕСКОМ КАРБИДЕ КРЕМНИЯ

**Магницкая М.В. , Щелкачев Н.М. , Камаева Л.В. , Цвященко А.В. 110**  
СТРУКТУРНАЯ И ТЕРМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ  
МОНОГЕРМАНИДОВ ТИПА В20 СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПРИ  
ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

- Максимова О.А., Овчинников С.Г., Лященко С.А.** 112  
ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАГНИТООПТИЧЕСКОГО ПАРАМЕТРА Q  
ПО ДАННЫМ МАГНИТООПТИЧЕСКОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ
- Мамонова М.В., Макаричева А.С.** 113  
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТОВ ЗАМЕЩЕНИЯ НА  
АДСОРБЦИОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА  
ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОК
- Мартьянов А.К., Седов В.С., Кузнецов С.В.** 116  
СИНТЕЗ В СВЧ ПЛАЗМЕ АЛМАЗНЫХ ПЛЁНОК С  
ВНЕДРЁННЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ YAG:Ce, ДЛЯ  
ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ  
ВЫСОКОЙ МОЩНОСТИ
- Меньшикова С.Г., Бражкин В. .** 118  
ВЛИЯНИЕ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И ТЕМПЕРАТУР НА  
ФОРМИРОВАНИЕ НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ В СПЛАВАХ  
 $Al_{86}Ni_2Co_6Gd_6$ ,  $Al_{86}Ni_6Co_4Gd_2Tb_2$ ,  $Al_{86}Ni_6Gd_4Tb_2Er_2$
- Меньшикова С.Г.** 119  
ВЯЗКОСТЬ, ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА И СВЕРХБЫСТРОЕ  
ЗАТВЕРДЕВАНИЕ РАСПЛАВОВ AL-CU (ДО 30 ат.% CU)
- Mogilyuk T.I., Grigoriev P.D.** 121  
SECOND HARMONICS OF MAGNETIC QUANTUM  
OSCILLATIONS IN LAYERED METALS
- Насыров А.Д., Гурский К.Д., Юрченко С.О., Крючков Н.П.** 123  
ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ АКТИВНЫХ  
СИСТЕМ В УСЛОВИЯХ ДИНАМИКИ ЛАНЖЕВЕНА
- Норман Г.Э., Негодин В.Д., Флейта Д.Ю.** 125  
КОЛЛЕКТИВНЫЕ ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ В КРИСТАЛЛАХ.  
ВКЛАД ДЕФЕКТОВ И АНГАРМОНИЗМА РЕШЁТКИ
- Павлов Н.С., Некрасов И.А., Бухвалов Д.В.** 127  
ЗАГАДКА ДЫРОЧНОГО КАРМАНА ВБЛИЗИ ЦЕНТРА ЗОНЫ  
БРИЛЛЮЭНА В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ МОНОСЛЕ FeSe

- Путилов А.В., Миронов С.В., Мельников А.С., Буздин А.И.**  
**ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ ЭФФЕКТ БЛИЗОСТИ В**  
**МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ СВЕРХПРОВОДНИК –**  
**ФЕРРОМАГНЕТИК 129**
- Ремизов С.В., Елистратов А.А.** **131**  
**РАЗВИТИЕ ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКИ ШВИГЕРА-**  
**КЕЛДЫША ДЛЯ СПИНОВЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ**  
**ПОДХОДА ПОПОВА-ФЕДОТОВА**
- Самохвалов А.В., Пластовец В.Д., Мельников А.С.** **133**  
**ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В ЭЛЕКТРОННОМ**  
**СПЕКТРЕ ПРИ ПЕРЕХОДЕ ОТ ВИХРЯ АБРИКОСОВА К**  
**ВИХРЮ ДЖОЗЕФСОНА**
- Симкин И.В., Яковлев Е.В., Юрченко С.О.** **135**  
**НОВЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ДИНАМИКИ САМОСБОРКИ В**  
**МЯГКОЙ МАТЕРИИ**
- Случанко Н.Е.** **136**  
**НЕОДНОРОДНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В**  
**ДОДЕКАБОРИДАХ  $Lu_xZr_{1-x}B_{12}$  СО СТРУКТУРНОЙ И**  
**ЭЛЕКТРОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ**
- Смирнов А. М.** **137**  
**ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭКСИТОНОВ В**  
**КОЛЛОИДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ**  
**НАНОКРИСТАЛЛАХ ПРИ ВЫСОКОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ**  
**ЛАЗЕРНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ**
- Сон Л.Д.** **139**  
**ТЕРМОДИНАМИКА ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ – СТЕКЛО**
- Стерхова И.В., Камаева Л.В., Щелкачев Н.М.,**  
**Ладьянов В.И.** **140**  
**О СКЛОННОСТИ К ОБЪЕМНОЙ АМОРФИЗАЦИИ**  
**РАСПЛАВОВ  $(Fe_{0,75}V_{0,15}Si_{0,1})-(Nb,Ta)$**

- Панкрушина Е.А. , Ушаков А.В., Абд-Эльмегид М.М., Стрельцов С.В. 142**  
 ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ПРЕДСКАЗАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ  
 МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ В КУБАНИТЕ  $\text{CuFe}_2\text{S}_3$
- Федоров И.Д., Стегайлов В.В. 144**  
 ДИССОЦИАЦИЯ ЭКСИТОНОВ КАК ПЕРВЫЙ ЭТАП  
 ПЕРЕХОДА РАЗОГРЕТОГО ПЛОТНОГО ВОДОРОДА В  
 ПЛАЗМУ
- Филоненко В.П. 146**  
 ЦИКЛИЧЕСКОЕ ДВОЙНИКОВАНИЕ В  
 МИКРОКРИСТАЛЛАХ КАРБИДА БОРА И АЛМАЗА
- Хайруллина Р.Р., Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В. 148**  
 ЛОКАЛЬНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ  
 РАВНОВЕСНОГО И ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ РАСПЛАВОВ  
 НИКЕЛЯ
- Чепкасов И.В. 151**  
 ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРКАЛЯЦИИ  
 ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ В БИСЛОЙНЫЙ ГРАФЕН И  $\text{MoS}_2$
- Чепкасов И.В. 152**  
 ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФТОРИДОВ СЕРЕБРА  
 ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ
- Чепкасов И.В., Квашнин А.Г., Попов З.И. 153**  
 $\text{V}_3\text{S}_4$  НОВЫЙ ДВУМЕРНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ  
 В СЕНСОРИКЕ
- Шацкий А.Ф., Литасов К.Д. 155**  
 ОБЗОР АППАРАТУРЫ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И  
 ПЕРСПЕКТИВЫ ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО РАЗВИТИЯ
- Шустин М. С., Поткина М. Н. 156**  
 АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПРОФИЛИ ДВУМЕРНЫХ  
 СКРИМИОНОВ

**Шутикова М.И., Стегайлов В.В. 159**  
ФОНОНЫ КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ МАГНЕТИТА: РАСЧЕТЫ В  
РАМКАХ DFT+U

**Яруллин Д.Т., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В. 160**  
ОРИГИНАЛЬНЫЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ КИНЕТИЧЕСКИХ  
ФАКТОРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

## **Л Е К Ц И И**



## ПОЧЕМУ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА «РАБОТАЕТ» В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ?

Бражкин В.В.

*Институт физики высоких давлений РАН*

*brazhkin@hppi.troitsk.ru*

Рассматриваются причины возможности использования канонического распределения Гиббса в конденсированных средах. В то время как основы статистической механики газов освещены во многих учебниках и обзорах весьма подробно, основания использования распределения Гиббса в кристаллах, стеклах и жидкостях рассматриваются достаточно редко. В большинстве учебников по-прежнему говорится лишь о качественной смене описания от механического к статистическому при рассмотрении очень большого числа частиц. В то же время, оказывается, что к гармоническому кристаллу из большого числа частиц распределение Гиббса формально неприменимо. Вместе с тем система даже из небольшого числа связанных ангармонических осцилляторов может демонстрировать все основные черты термодинамически равновесных кристаллов и жидкостей. Именно нелинейность (ангармонизм) колебаний приводит к перемешиванию фазовых траекторий и эргодичности конденсированных сред. При переходе системы к термодинамически равновесному состоянию существует 3 характерных масштаба времен: время термализации системы (фактически, время установления локального распределения Гиббса в импульсном пространстве и установления локальной температуры); время установления однородной температуры в системе после контакта с термостатом и, наконец, время установления эргодичности в системе (фактически, время «заматания» всего фазового пространства, в том числе его координатной части). Обсуждаются вопросы генезиса образования дефектов и диффузии в кристаллах и стеклах. Предложен новый подход к проблеме стеклования с точки зрения размягчения стекол при нагревании.

# АНОМАЛЬНЫЙ И КВАНТОВЫЙ ТРАНСПОРТ ЭЛЕКТРОНОВ И ЭКСИТОНОВ В ДВУМЕРНЫХ ДИРАКОВСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Глазов М.М.

*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 194026 Санкт-Петербург*

*glazov@coherent.ioffe.ru*

Лекция посвящена квантовым транспортным эффектам в двумерных материалах с «массивным» дираковским спектром носителей заряда.

Первая часть лекции посвящена долинному эффекту Холла на электронах и экситонах. Долинный эффект Холла относится к широкому классу явлений, объединенных общим термином «аномальный эффект Холла». В системах с многодолинным спектром направленное движение квазичастиц приводит к возникновению поперечных противонаправленных потоков квазичастиц в разных долинах. Основное внимание в лекции уделено микроскопическим механизмам долинного эффекта Холла, в том числе, в случае, когда исходный поток квазичастиц обусловлен эффектом увлечения электронов или экситонов фононами или фотонами. Показано, что в диффузионных системах из трех известных в литературе механизмов, связанных с (i) аномальной скоростью, (ii) сдвигами волновых пакетов при рассеянии и (iii) асимметричным рассеянием, вклад аномальной скорости сокращается частью сдвигового вклада, а результирующий эффект определяется некомпенсированным сдвиговым вкладом и асимметричным рассеянием [1,2]. Также проанализирован долинный эффект Холла в сверхчистых каналах, где длина свободного пробега электронов превосходит ширину канала. В этом случае долинный эффект Холла приводит к нетривиальному распределению долинной поляризации по сечению канала, причем механизмы (i) – (iii) проявляются в разных областях канала: аномальная скорость в «толще» канала, а сдвиговой вклад вблизи краев.

Вторая часть доклада посвящена эффекту слабой локализации двумерных электронов и экситонов в случае, когда основным механизмом рассеяния является квазиупругое рассеяние на длинноволновых акустических фононах. Показано, что с ростом

температуры квантовая поправка к коэффициенту диффузии квазичастиц возрастает, поскольку относительное изменение энергии в результате испускания или поглощения фонона уменьшается с увеличением температуры. При дальнейшем возрастании температуры, когда оказывается существенным взаимодействие с оптическими фононами и бездисперсионными фононами на краю зоны Бриллюэна квантовые поправки в коэффициент диффузии падают. Оценки показывают, что квантовые поправки могут вносить значительный вклад в коэффициент диффузии экситонов в монослоях диалкогогенидов переходных металлов [3].

## Литература

1. M. M. Glazov and L. E. Golub, Phys. Rev. B, **102**, 155302, **2020**
2. M. M. Glazov and L. E. Golub, Phys. Rev. Lett., **125**, 157403, **2020**
3. M.M. Glazov, Phys. Rev. Lett., **124**, 166802, **2020**

## **АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В МАГНЕТИКАХ С НЕТРИВИАЛЬНЫМИ СПИНОВЫМИ СТРУКТУРАМИ**

Глушков В. В.

*Институт общей физики им. А.М.Прохорова Российской академии  
наук  
glushkov@lt.gpi.ru*

При обсуждении аномального эффекта Холла (АЭХ) в магнитных металлах обычно различают собственный вклад, определяемый аномальной поперечной добавкой к скорости носителей заряда за счет фазы Берри, и примесный АЭХ, возникающий за счет рассеяния электронов на магнитных примесях [1]. В первом случае вклад фазы Берри в состоянии со спонтанной намагниченностью определяет спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) [1,2], хотя собственный АЭХ может возникать и для киральных спиновых систем без дальнего магнитного порядка. В частном случае неколлинеарного магнетика скалярная киральность, определяемая смешанным произведением трех некопланарных спинов  $S_i \cdot (S_j \times S_k)$ , приводит к возникновению фиктивного магнитного

поля даже в отсутствии СОВ [3,4]. При движении электрона в киральном магнетике возникает дополнительная фаза Берри в координатном пространстве, определяющая появление топологического эффекта Холла [5-6]. С другой стороны, нетривиальная фаза Берри в импульсном пространстве может инициировать нелинейный нетрадиционный АЭХ, наблюдавшийся в магнитных полупроводниках  $\text{EuTiO}_3$  [7] и вейлевских полуметаллах  $\text{RPtBi}$  ( $\text{R}=\text{Gd}, \text{Dy}$ ) [8].

В докладе на примере редкоземельных гекса- и додекаборидов [9-10] анализируются различные случаи реализации нетрадиционного АЭХ. Показано, что беспорядок, связанный с добавлением магнитной примеси и/или увеличением степени дефектности боридов редкоземельных металлов, приводит к заметному росту амплитуды дополнительного вклада в АЭХ, наиболее сильно проявляющемуся в окрестности перехода в магнитоупорядоченную фазу в магнитных полях до 2 Тл. Из сопоставления полученных результатов и литературных данных сделан вывод о том, что наряду с фрустрацией обменного взаимодействия, определяющей формирование сложной спиновой текстуры в магнитных металлах, важную роль играют эффекты, вызванные флуктуациями электронной и/или спиновой плотности [9].

Работа поддержана проектом РФФИ 18-02-01152.

## Литература

1. N. Nagaosa et al., *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 1539, **2010**
2. А. Ф. Барабанов и др., *УФН*, **185**, 479, **2015**
3. C. D. Batista et al., *Rep. Prog. Phys.*, **79**, 084504, **2016**
4. Y. Zhang et al., *Phys. Rev. B*, **95**, 075128, **2017**
5. Y. Taguchi et al., *Science*, **291**, 2573, **2001**
6. Z. H. Liu et al., *Sci. Rep.*, **7**, 515, **2017**
7. K. S. Takahashi et al., *Sci. Adv.*, **4**, eaar7880, **2018**.
8. H. Zhang et al., *Phys. Rev. B*, **102**, 094424, **2020**.
9. N. Sluchanko et al., *Phys. Rev. B*, **103**, 035117, **2021**
10. J. Shen et al., *arXiv:2106.02904*, **2021**

# ОСОБЕННОСТИ СОСТОЯНИЯ С ВОЛНОЙ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В ТРИТЕЛЛУРИДАХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

П.Д. Григорьев<sup>1,2,3</sup>, П.А. Воробьев<sup>3</sup>, А.А. Синченко<sup>4,5</sup>

<sup>1</sup>*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН,  
Черноголовка, Россия*

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

<sup>3</sup>*НИТУ «МИСиС», Москва, Россия*

<sup>4</sup>*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
119991 Москва, Россия*

<sup>5</sup>*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова  
РАН, 125009 Москва, Россия*

Приведен обзор некоторых интересных свойств трителлуридов редкоземельных металлов, которые связаны с волной зарядовой плотности и являются общими для разных систем.

В  $R\text{Te}_3$  соединениях обнаружен и объяснен сильный гистерезис коэффициента Холла между охлаждением и нагреванием в низкотемпературном диапазоне, где возникает вторая волна зарядовой плотности (ВЗП) [1]. Мы предполагаем, что этот эффект возникает в результате конкуренции двух нестабильностей: пересечения двух электронных зон на уровне Ферми, образованных  $p_x$  и  $p_y$ -орбиталями  $\text{Te}$ , и второй ВЗП, которые имеют близкую энергию. Расчет электронной восприимчивости на волновом векторе ВЗП с и без антикроссинга электронного спектра из-за пересечения зон дает разумную оценку температурного диапазона этого гистерезиса.

Рассчитана [2] электронная восприимчивость трителлуридов редкоземельных металлов  $R\text{Te}_3$  как функция температуры, волнового вектора и параметров электронной дисперсии. Сопоставление полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными по температуре перехода и волновому вектору волны зарядовой плотности в этих соединениях позволило сделать прогнозы об эволюции параметров электронной дисперсии с изменением атомного числа редкоземельных металлов ( $R$ ).

Проведены измерения и предложена их теоретическая интерпретация магнитосопротивления в состоянии с волной зарядовой плотности (ВЗП) в редкоземельных трителлуридах, а именно  $\text{TbTe}_3$  и  $\text{HoTe}_3$  [3]. Зависимость магнитосопротивления от магнитного поля  $B$  имеет температурно-зависимый кроссовер между

обычным квадратичным законом при высоких температурах  $T$  и слабым магнитным полем  $B$  и необычной линейной зависимостью при низких  $T$  и высоких  $B$ . Предложена довольно общая модель для объяснения линейного магнетосопротивления с учетом сильного рассеяния квазичастиц на флуктуациях ВЗП вблизи «горячих точек» поверхности Ферми, где перестройка поверхности Ферми из-за ВЗП является самой сильной. Эта теория развивает предложенную ранее в работе [4].

Исследование выполнено при поддержке грантов РФФИ №19-02-01000 и 21-52-12027.

### Литература

1. P.D. Grigoriev, A.A. Sinchenko, P.A. Vorobyev, A. Hadj-Azzem, P. Lejay, A. Bosak, P. Monceau, Interplay between band crossing and charge density wave instabilities, [Phys. Rev. B 100, 081109\(R\) \(2019\)](#)
2. P.A. Vorobyev, P.D. Grigoriev, K.K. Kesharpu, V.V. Khovaylo, The evolution of electron dispersion in the series of rare-earth tritelluride compounds obtained from their charge-density-wave properties and susceptibility calculations, [Materials, 12\(14\), 2264 \(2019\)](#)
3. A.A. Sinchenko, P.D. Grigoriev, P. Lejay, P. Monceau, Linear magnetoresistance in the charge density wave state of quasi-two-dimensional rare-earth tritellurides, [Phys. Rev. B 96, 245129 \(2017\)](#)
4. L. M. Falicov and H. Smith, Phys. Rev. Lett. **29**, 124 (1972)

# МАССИВЫ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ

Капуткина Н. Е.

*Национальный исследовательский технологический университет*

*«МИСиС», г. Москва*

*kaputkina.ne@misis.ru*

Алтайский М. В.

*Институт космических исследований РАН, г. Москва*

*altaisky@rssi.ru*

Массивы квантовых точек (КТ) обладают значительным потенциалом для применения в системах обработки информации. Их преимущества - масштабируемость технологии производства массивов КТ, миниатюрность отдельных элементов (размер отдельного кубита на КТ может быть порядка 10 нм). Низкое энергопотребление и отсутствие необходимости охлаждения до сверхнизких температур особенно значимо в сравнении с использованием в качестве элементной базы сквидов (как уже в созданных прототипах и коммерчески используемой продукции фирм D-wave, Microsoft и др.), ионных ловушек (Honeywell и др.) и т. п.. Приложение внешних электромагнитных полей дает возможность управлять как параметрами отдельных квантовых точек (такими как спектр и характерная область локализации), так и взаимодействием между различными КТ системы. Устанавливая оптические и электрические связи между КТ, можно управлять корреляциями между состояниями отдельных КТ. Взаимодействие между отдельными точками в массиве, выполненном на основе полупроводниковой гетероструктуры, осуществляется путем формирования экситонов и их взаимодействия с фононами гетероструктуры. Поведение такой системы, для случая двух и трех кубитов, исследовалось в серии работ авторов [1-4], путем численного решения уравнения фон Неймана для случая двух или трех квантовых точек. Результаты численного моделирования показывают возможность сохранения квантовых эффектов в системах КТ вплоть до достаточно высоких температур, порядка десятков градусов Кельвина. Были проведены численные исследования динамики трехкубитной квантовой системы, на основе массива из квантовых

точек, взаимодействующей с флуктуирующим окружением. Простая квантовая конструкция, топологически эквивалентная однослойному перцептрону с двумя входами, позволяет, в принципе, реализовать процедуру исключяющего ИЛИ, что не под силу классическому однослойному перцептрону. Меняя конфигурации связей, можно получить различные классификации пространства квантовых состояний трехкубитового регистра, т. е. реализовать классификационную функцию квантовой нейронной сети. Рассматриваются алгоритмические и неалгоритмические методы квантовой обработки информации, а также их применение к построению систем искусственного интеллекта.

## Литература

1. M.V. Altaisky, N.N. Zolnikova, N. E. Kaputkina, V.A. Krylov, Yu.E. Lozovik, and N. S. Dattani, *Applied Physics Letters*, **108**, 103108, **2016**
2. M.V. Altaisky, N.N. Zolnikova, N. E. Kaputkina, V.A. Krylov, Yu.E. Lozovik, and N. S. Dattani *Photonics and Nanostructures — Fundamentals and Applications*, **24**, 24, **2017**
3. M.V. Altaisky, N.E. Kaputkina, and V.A. Krylov. *Physics of Atomic Nuclei*, **81**,792, **2018**
4. M.V. Altaisky, N.E. Kaputkina, V.A. Krylov, *Physics of Particles and Nuclei Letters*, **16**, 911, **2019**

## **КВАНТОВЫЕ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В МНОГОКАНАЛЬНЫХ КОРРЕЛИРОВАННЫХ ТУННЕЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ**

В.Н. Манцевич<sup>+</sup>, В.Н. Лучкин<sup>+</sup>, Н.С. Маслова<sup>+</sup>, П.И. Арсеев<sup>++</sup>

<sup>+</sup>*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова*

<sup>++</sup>*Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН*

*vmantsev@gmail.com*

Примесные атомы и квантовые точки, локализованные в области туннельного контакта значительно влияют на свойства электронного транспорта в полупроводниковых структурах [1,2]. В многоканальных туннельных системах изменение спектров туннельной проводимости



обусловлено квантовыми интерференционными эффектами, приводящими к появлению эффекта Фано [3]. В данной лекции обсуждается вопрос о влиянии кулоновского взаимодействия хаббардовского типа на спектры туннельной проводимости промежуточной системы, образованной несколькими взаимодействующими примесными атомами или квантовыми точками, локализованными между берегами туннельного контакта. Будет обсуждено обобщенное выражение для эффективной амплитуды туннелирования через произвольную многоканальную промежуточную систему, которое позволило оценить роль различных интерференционных эффектов. Будет продемонстрировано, что переход от режима Фано к режиму симметричной блокады можно наблюдать при варьировании соотношения между скоростями туннелирования в исследуемой системе [4].

Также будет показано, что форма Фано спектров туннельной проводимости сильно изменяется при наличии локального кулоновского взаимодействия между локализованными электронами в промежуточной системе. Основным эффектом, определяющим форму туннельных пиков, может быть не интерференция Фано, а зависимость неравновесных чисел заполнения на примесных атомах или квантовых точках от величины напряжения смещения на туннельном контакте [4].

Работа выполнена при поддержке гранта Президента для молодых ученых (грант МД-781.2021.1.2) и гранта РФФИ (грант 20-32-70001 Стабильность).

## Литература

1. J. Chen, M.A. Reed, A.M. Rawlett, J.M. Tour, *Science*, **286**, 1550–1552, **1999**
2. V.V. Shorokhov, D.E. Presnov, S.V. Amitonov, Y.A. Pashkin, V.A. Krupenin, *Nanoscale*, **9**, 613–620, **2017**
3. U. Fano, *Phys. Rev.*, **124**, 1866–1878, **1961**
4. N.S. Maslova, V.N. Mantsevich, V.N. Luchkin, V.V. Palyulin, P.I. Arseyev, I.M. Sokolov, to be published.

# **ФЛУКТУАЦИИ ТОКА ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ ЧЕРЕЗ ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ И ПЕРЕПУТАННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ С КУЛОНОВСКИМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ**

Маслова Н. С.

*Кафедра квантовой электроники и Центр квантовых технологий,  
физический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991*

*Москва, Россия*

*nsmaslova@gmail.com*

Исследование флуктуаций туннельного тока при электронном транспорте через промежуточную коррелированную структуру представляет интерес как для понимания фундаментальных проблем квантовой физики, так и для решения различных прикладных задач, в том числе и для оптимизации соотношения сигнал-шум в современных электронных устройствах. Наиболее распространённым подходом для изучения туннельного тока и спектральной плотности его флуктуаций считается подход Ландауэра, развитый в работе [1]. Однако этот подход обладает рядом существенных ограничений, в частности, он применим только для величин напряжения на туннельном переходе, много меньших характерных ширин уровней локализованных состояний промежуточной структуры. Кроме того, этот метод не даёт корректного описания кулоновских корреляций при туннелировании через многоэлектронные состояния.

Существует альтернативный, достаточно общий подход, позволяющий анализировать особенности туннельного тока и спектра плотности его флуктуаций во всём диапазоне напряжений на туннельном переходе для широкого класса систем, в которых электронный транспорт происходит через промежуточную структуру [2]. Данный подход основан на обобщении диаграммной техники Келдыша для псевдочастиц, учитывающем ограничение на число частиц на операторном уровне, что позволяет исключить нефизические состояния. В рамках этого подхода проанализированы свойства туннельного тока и спектральной плотности его флуктуаций при электронном транспорте через одноэлектронные состояния и двухэлектронные перепутанные состояния (триpletные и синглетные). Обнаружено, что туннельный ток и спектр его шума сильно зависят от пространственной спиновой симметрии системы, а также от её начального состояния. Показано, что туннельный ток и спектр его шума могут резко уменьшаться из-за блокировки

отдельных каналов туннелирования при изменении приложенного напряжения или напряжения на затворе. При электронном транспорте через перепутанные состояния фактор Фано (отношение спектральной плотности шума на нулевой частоте к величине тока) резко уменьшается в определенном диапазоне напряжений на туннельном переходе. Это позволяет оптимизировать соотношение сигнал-шум при туннелировании через перепутанные состояния в коррелированных квантовых точках и использовать их для задач квантовых коммуникаций.

Исследование выполнено при поддержке грантов РФФИ (№ 19-02-00087) и РНФ (№ 18-72-10002).

## Литература

1. Y. Blanter, M. Büttiker, Phys. Rep. **336**, 1, **2000**
2. N. S. Maslova, P. I. Arseyev, V. N. Mantsevich, Sci. Rep. **11**, 336, **2021**

## КОЛЛЕКТИВНЫЕ МОДЫ В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СИСТЕМАХ

Мельников А.С.

*Институт Физики микроструктур РАН, 603950, Нижний Новгород, ГСП-105*

В докладе будет представлен обзор современного состояния дел по экспериментальному и теоретическому исследованию коллективных мод в сверхпроводящих системах, различных методов их возбуждения и детектирования. Речь пойдет при этом как о динамике колебаний модуля сверхпроводящего параметра порядка, так и о динамике его фазы. Будут обсуждены различные теоретические модели, используемые для описания этой динамики, включая как феноменологические подходы, так и микроскопическое описание.

Особое внимание будет уделено обсуждению когерентной

динамики колебаний модуля сверхпроводящего параметра порядка в различных сверхпроводниках и гибридных сверхпроводящих системах. Эти осцилляции абсолютной величины сверхпроводящей щели носят название мод Хиггса, по аналогии с бозоном Хиггса из физики элементарных частиц. Развитие терагерцовой экспериментальной техники позволило напрямую пронаблюдать осцилляции сверхпроводящего параметра порядка с помощью *rip-tri* probe методики. Также будут проанализированы экспериментальные результаты по наблюдению мод Хиггса в измерениях нелинейного отклика сверхпроводящих систем на третьей гармонике.

Исследование динамики сверхпроводящих систем может быть важно в контексте идентификации типа сверхпроводящего спаривания в различных естественных сверхпроводниках, а также определения характеристик сверхпроводящих корреляций в структурах с эффектом близости. Мы обсудим новые типы мод Хиггса в системах с индуцированной сверхпроводимостью, многозонных сверхпроводниках и сверхпроводниках с анизотропным спариванием, проанализируем экспериментальные подходы к наблюдению этих мод. Планируется обсудить, в частности, возможные сценарии возбуждения коллективных колебаний сверхпроводящего параметра порядка в структурах сверхпроводник – ферромагнетик, где данные колебания могут существенно взаимодействовать с динамическими модами магнитного момента ферромагнитной подсистемы.

Еще одна интересная возможность возбуждения коллективных мод сверхпроводящего параметра порядка возникает при воздействии на сверхпроводник циркулярно поляризованного электромагнитного излучения. Возникающий при этом усредненный по времени вклад в магнитный момент системы (обратный эффект Фарадея) непосредственно связан с особенностями динамики коллективных мод в сверхпроводящем конденсате.

Работа поддержана НЦМУ «Центр фотоники», при финансировании Министерством науки и высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2020-906.

# МНОГОЧАСТИЧНАЯ ЗАПУТАННОСТЬ

## НЕТОЖДЕСТВЕННЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ

Михеенков А. В.<sup>1,2</sup>, Валиулин В.Э.<sup>1,2</sup>, Кугель К. И.<sup>3,4</sup>, Щелкачев Н.М.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений РАН*

<sup>2</sup>*Московский физико-технический институт*

<sup>3</sup>*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН*

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

*mikheev@bk.ru*

Доклад во многом повторяет тезисы доклада-2020, не состоявшегося из-за ковида. Во-первых, это обзор основных количественных характеристик запутанного состояния, их сравнение в части наглядности и удобства использования в многочастичных конденсированных системах и в численном анализе [1]-[4].

Во-вторых, изложены результаты исследования запутанности двух многочастичных подсистем (спиновой и псевдоспиновой) в удобной для этого модели – модели Кугеля-Хомского [5]. Отметим, что варианты модели возникают не только в спин-орбитальной физике, но и в актуальной области ультрахолодных атомов в ловушках [6].

Методом точной диагонализации изучается запутанность двух подсистем для конечной одномерной цепочки с гамильтонианом

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

$S_i$  и  $T_i$  – операторы спина и псевдоспина ( $S=1/2$ ,  $T=1/2$ ), все суммы – по связям ближайших узлов. Кроме канонического вида, запутанность вычислялась также для альтернативных видов спин-псевдоспинового взаимодействия, например  $(S_i S_j)(T_i^z T_j^z)$ .

Для характеристики степени запутанности используется один из наиболее популярных критериев – Concurrence (перевода термина пока нет, а буквальный перевод – «совпадение», «согласованность» – не вполне адекватен). Поскольку вычисляется точная матрица плотности, может, разумеется, быть определен и любой другой критерий.

Во всех случаях вычисляется запутанность в нулевом внешнем поле (эти результаты для некоторых моделей уже известны, см. [7] и ссылки там), а также влияние внешних полей, как в одной, так и в обеих подсистемах. Изучен также вариант с шахматными полями (он приводит к интересным и интуитивно неочевидным результатам).

Проводится сравнение с предыдущими (полуаналитическими) работами авторов [8],[9]. Пример результатов показан на Рис.1.

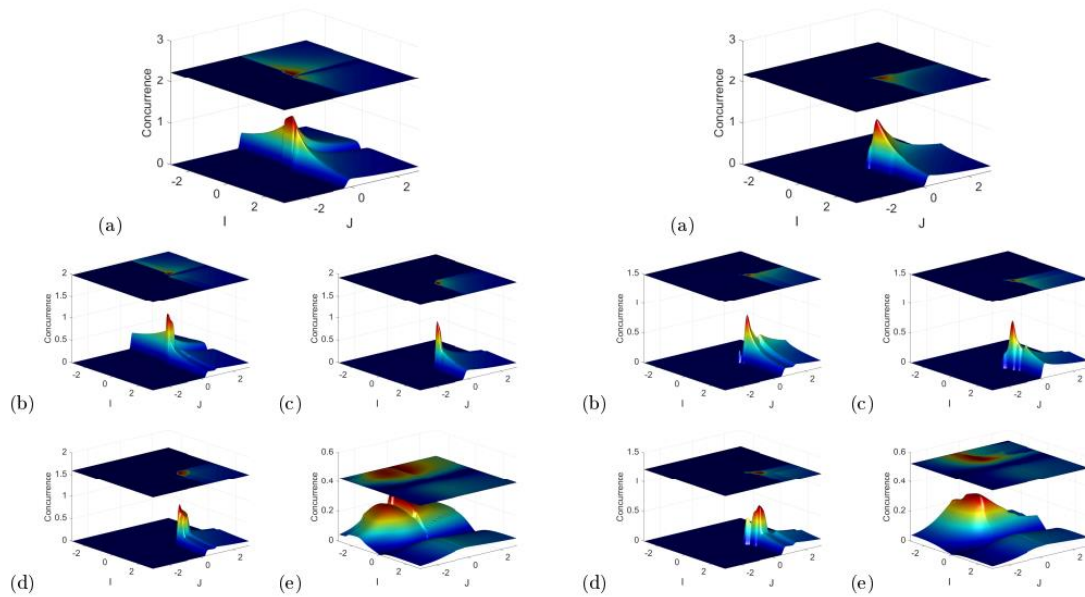


Рис. 1. Запутанность для межподсистемного обмена  $\sim K \Sigma(S_i S_j)(T_i^z T_j^z)$ . а) без поля, б)-е) поле в одной, другой подсистеме, в обеих, шахматное в обеих. Слева  $K=-1$ , справа  $K=+1$ .

Кроме того, предложен (эмпирический) локальный критерий определения области запутанности, не требующий нахождения полной матрицы плотности.

Исследование выполнено при поддержке грантов РФФИ № [19-02-00509](#) и РНФ № 18-12-00438.

## Литература

1. И. В. Баргатин, Б. А. Гришанин, В. Н. Задков, УФН, **171**, 625, **2001**  
L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral, Rev. Mod. Phys., **80**, 517, **2008**
2. R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki, Rev. Mod. Phys., **81**, 865, **2009**
3. J. Eisert, M. Cramer, M. B. Plenio, Rev. Mod. Phys., **82**, 277, **2010**.
4. К.И.Кугель, Д.И.Хомский, УФН, **136**, 621, **1982**
5. M. Belemuk, N. M. Chtchelkatchev, A. V. Mikheyenkov, and K. I. Kugel, Phys. Rev. B **96**, 094435, **2017**; New J. Phys. **20**, 063039, **2018**
6. D. Gotfryd, E. M. Parschke, J. Chaloupka, A. M. Oles, and K. Wohlfeld, Phys. Rev. R **2**, 013353, **2020**

7. М. Ю. Каган, К. И. Кугель, А. В. Михеенков, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ, **100**, 207, **2014**

8. В.Э. Валиулин, А. В. Михеенков, К.И. Кугель А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ, **109**, 557, **2019**

## КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА ЧАСТИЦ В ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ЮКАВА-ЖИДКОСТИ

Мокшин А. В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет*

*email: [anatolii.mokshin@mail.ru](mailto:anatolii.mokshin@mail.ru)*

В настоящей работе будет показано, что описание коллективной динамики классической многочастичной системы, где межчастичное взаимодействие определяется потенциалом Юкава, может быть выполнено в рамках самосогласованной релаксационной теории [1]. Особенности теории является то, что (i) входными величинами в ней являются лишь структурные характеристики – например, функция радиального распределения частиц, а также термодинамические условия – температура, плотность системы; (ii) теория не содержит подгоночных параметров, (iii) теория корректно воспроизводит все известные результаты моделирования молекулярной динамики на широкой области фазовой диаграммы Юкава-системы. Показано, что теория согласуется и обобщает выражение для динамического структурного фактора, получаемого в рамках известной модели, основой которой является теория моментов [2]. Обсуждается взаимосвязь с известным QLCA-приближением, используемым для расчета некоторых характеристик коллективной динамики Юкава-жидкости.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 19-12-00022).

### Литература

1. A. V. Mokshin, B. N. Galimzyanov, J. Phys.: Condens. Matter, **30**, 085102, **2018**

2. Yu. V. Arkhipov et al., Phys. Rev. Lett., **119**, 045001, **2017**

# РАЗМЕРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ХАРАКТЕРИСТИКАХ НЕРАВНОВЕСНОГО ПОВЕДЕНИЯ СЛОЖНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ, ОПИСЫВАЕМЫХ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛЬЮ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В.

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского  
prudnikov@univer.omsk.su*

Представлены результаты исследований фундаментальных вопросов неравновесной статистической физики, связанных с изучением особенностей неравновесного поведения систем с медленной динамикой, характеризующихся эффектами старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы. Данными особенностями неравновесного поведения обладают системы, испытывающие фазовые переходы второго рода [1], поскольку их критическая динамика характеризуется аномально большими временами релаксации, а также мультислойные магнитные наноструктуры, в которых из-за эффектов сильной пространственной спиновой корреляции нанослоев наблюдается медленная релаксационная динамика намагниченности при замораживании системы в неравновесном состоянии [2]. Эволюция таких систем на временах много меньших времени релаксации начинает зависеть от начальных состояний системы и происходит нарушение трансляционной симметрии во времени.

Трехмерная ферромагнитная модель Гейзенберга является одной из традиционных статистических моделей, используемых для описания фазовых переходов в самых различных спиновых системах, в частности, в таких переходных металлах как Fe, Co, Ni и их сплавах. Учет важных для описания магнитных свойств реальных систем эффектов магнитной анизотропии привел к введению анизотропной модели Гейзенберга. Нами представлены результаты численных исследований методами Монте-Карло неравновесной критической динамики трехмерной модели Гейзенберга с учетом влияния анизотропии типа легкая ось. Проведено сопоставление полученных характеристик неравновесного поведения намагниченности, автокорреляционной функции и динамической восприимчивости с аналогичными для изотропной модели Гейзенберга и трехмерной модели Изинга при эволюции из различных начальных состояний.



Выявленные экспериментальными методами [3] и методами компьютерного моделирования [4] размерные изменения критического поведения ультратонких анизотропных магнитных пленок с изменением их толщины - от двумерных свойств к свойствам объемных материалов, находят свое отражение в размерных изменениях равновесных и неравновесных свойств мультислойных магнитных структур [5, 6]. Представлены результаты исследования размерных изменений характеристик таких как автокорреляционная функция и магнитосопротивление, при неравновесном поведении структур для различных начальных состояний, температур и толщин ферромагнитных пленок в структуре. Выявлено существенное влияние начальных состояний на двухвременные зависимости автокорреляционной функции и магнитосопротивления с проявлением в них эффектов старения. Показано, что в долговременном режиме временная зависимость магнитосопротивления выходит на плато со значениями, зависящими от температур  $T_0$  начального состояния, температур замораживания  $T_s$ , толщины ферромагнитных пленок  $N$  и типа магнитной анизотропии в наноструктурах.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ.

## Литература

1. В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова, УФН, **187**, 817, **2017**
2. T. Mukherjee, M. Pleimling, C. Binek, Phys. Rev. B **82**, 134425, **2010**
3. C.A.F. Vaz, J.A.C. Bland, G. Lühoff, Rep. Prog. Phys. **71**, 056501, **2008**
4. P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov et al., JMMM, **387**, 77, **2015**
5. P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov et al., JMMM, **470**, 143, **2019**
6. P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov et al., JMMM, **482**, 201, **2019**

## ОКСИДЫ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В “АДСКИХ” УСЛОВИЯХ

Стрельцов С. В.

*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН*  
*streltsov@imp.uran.ru*

Оксиды переходных металлов без всякого сомнения являются одним из ключевых классов материалов современной физики конденсированного состояния. Некоторые из них являются сверхпроводниками, другие – мультиферроиками, многие из них оказываются магнитными, встречаются топологические изоляторы и тд. Однако свойства переходных металлов могут сильно меняться под давлением и в случае высоких температур. В данном обзорном докладе будет рассмотрено, каким образом меняются электронные и магнитные свойства различных оксидов переходных металлов при давлениях свыше 100 ГПа и температурах более 1000 К.

Работа была поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (проект РФФИ 20-32-70019)

## СПИНОВЫЕ ЦЕНТРЫ В КАРБИДЕ КРЕМНИЯ

Тарасенко С. А.

*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург*  
*tarasenko@coherent.ioffe.ru*

Оптически управляемые спиновые центры в широкозонных кристаллах, такие как NV центры в алмазе или вакансии кремния  $V_{Si}$  в карбиде кремния (SiC), представляют в настоящее время большой интерес для фундаментальных исследований и перспективны для применений в метрологии и квантовых технологиях.

В докладе представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований спиновой динамики и оптических свойств центров  $V_{Si}$  в карбиде кремния [1]. Такие центры обладают спином  $3/2$  и могут находиться в суперпозиции 4 базисных состояний: состояний с проекцией спина  $\pm 3/2$  и  $\pm 1/2$  на гексагональную ось

кристалла. Изучена тонкая структура основного и возбужденного состояний; обосновано, что структура зависит от политипа SiC и положения вакансии в кристаллической решетке. В политипе 6H один из трех неэквивалентных  $V_{Si}$  обладает инвертированной структурой возбужденных мультиплетов, что кардинально изменяет правила отбора для оптических переходов, направленность и поляризацию фотолюминесценции, и допускает реализацию квантового запутывания поляризации фотона и спинового состояния центра.

Обсуждается теоретическое описание спиновой динамики ансамбля центров, в том числе в условиях оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР), механизмы оптического выстраивания центров по спину и формирования сигнала ОДМР, использование спиновых центров в магнитометрии [2].

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант 19-12-00051).

## Литература

1. S.A. Tarasenko, A.V. Poshakinskiy, D. Simin et al., Spin and optical properties of silicon vacancies in silicon carbide - a review, *Phys. Status Solidi B*, **255**, 1700258, **2018**
2. V.A. Soltamov, C. Kasper, A.V. Poshakinskiy et al., Excitation and coherent control of spin qubit modes with sub-MHz spectral resolution, *Nature Commun.*, **10**, 1678, **2019**

## **ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБЪЯСНЕНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ГРАДИЕНТОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В КРИСТАЛЛАХ: ПРИЛОЖЕНИЕ К ZN, CD И TIO<sub>2</sub>**

Н. М. Щелкачев<sup>1</sup>, А.В. Николаев<sup>2</sup>, Д.А. Саламатин<sup>1</sup> и А.В. Цвященко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт Физики Высоких Давлений РАН*

<sup>2</sup>*Институт Ядерной Физики МГУ*

*n.chtchelkatchev@gmail.com*

На основе ab initio расчетов зонной структуры сформулирован общий теоретический метод описания температурной зависимости градиента электрического поля в твердых телах. В методе

используется процедура усреднения мультипольной компоненты электронной плотности ( $l = 0$ ) внутри шара, колеблющегося с ядром в его центре. В результате усреднения каждая фурье компонента ( $K = 0$ ) на сфере эффективно уменьшается на квадратный корень из фактора Дебая-Уоллера [ $\exp(-W)$ ]. Градиент электрического поля, связанный с суммой компонентов  $K$ , чаще всего уменьшается с температурой ( $T$ ), но при определенных условиях из-за взаимодействия членов противоположных знаков он также может увеличиваться с ростом  $T$ . Метод применен к расчетам температурной эволюции градиентов электрического поля цинка и кадмия (в гексагональной решетке). Для расчетов в рамках нашей модели решающее значение имеет температурная зависимость среднеквадратичных смещений, которая может быть взята из эксперимента или получена из фононных мод в гармоническом приближении. Для случая Zn мы использовали данные, полученные при дифракции рентгеновских лучей на монокристалле. Кроме того, для Zn и Cd мы рассчитали среднеквадратичные смещения методом функционала плотности в QUANTUM ESPRESSO. Наши расчеты с использованием экспериментальных данных для смещений в Zn очень точно воспроизводят температурную зависимость градиента электрического поля. В гармоническом приближении QUANTUM ESPRESSO переоценивает уменьшение градиентов электрического поля в Zn и Cd с температурой. Наши расчеты показывают, что ангармонические эффекты играют важную роль в температурной зависимости градиентов электрического поля [1].

Применяя наш метод для рутила  $\text{TiO}_2$ , вычисляя температурную эволюцию среднеквадратичных смещений Ti, мы воспроизводим эффект аномального повышения температуры градиента электрического поля в узлах Ti в  $\text{TiO}_2$ , наблюдаемое экспериментально. Хотя фактор Дебая-Уоллера всегда уменьшает соответствующую составляющую Фурье, в  $\text{TiO}_2$  из-за взаимодействия членов противоположных знаков он приводит к чистому увеличению всей суммы с температурой, что приводит к росту градиента электрического поля. Количественно мы находим, что увеличение градиента электрического поля составляет только половину экспериментального значения, которое мы приписываем ангармоническим эффектам или сильному влиянию положения кислорода. Кроме того, наш метод воспроизводит необычную температурную зависимость параметра асимметрии  $\eta$ , которая

сначала убывает с температурой, затем стремится к нулю, а затем увеличивается [2].

Работа поддержана грантом РФФ №18-12-00438.

## Литература

1. A. V. Nikolaev, N. M. Chtchelkatchev, A. V. Bibikov, D. A. Salamatin, and A. V. Tsvyashchenko, Phys. Rev. **B 102**, 174305, **2020**
2. A. V. Nikolaev, N. M. Chtchelkatchev, D. A. Salamatin, and A. V. Tsvyashchenko, Phys. Rev. **B 101**, 064310, **2020**

## **ДОКЛАДЫ**

## ТРЕХМЕРНАЯ МАГНИТНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА $\text{CeV}_6$

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

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

<sup>2</sup>*Московский Физико-Технический Институт*

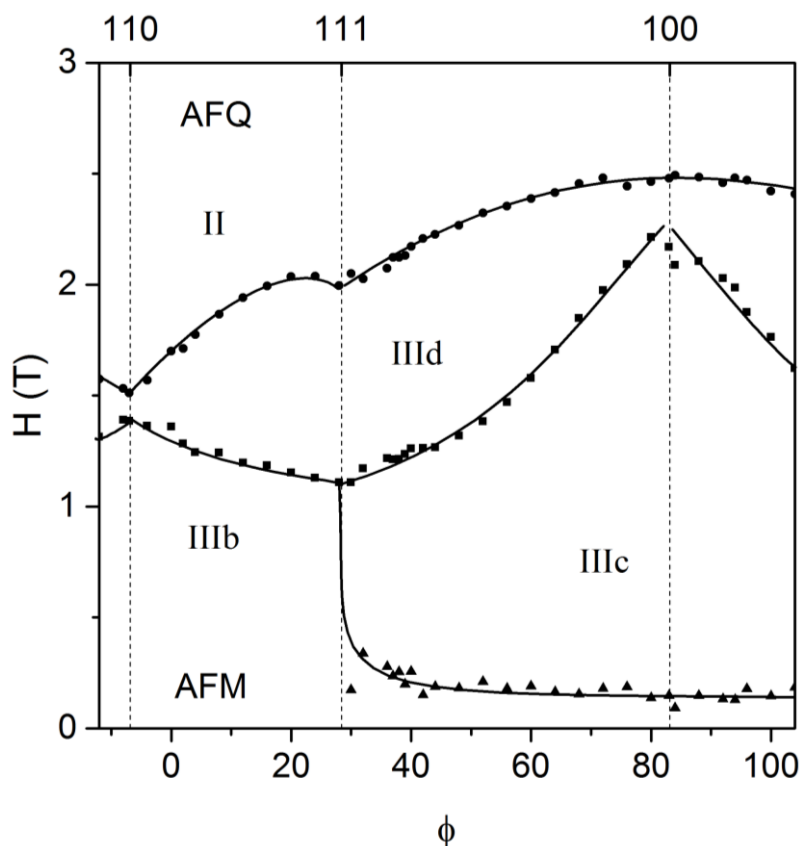
<sup>3</sup>*Институт проблем материаловедения им. И.М.Францевича ИАНУ*

<sup>4</sup>*Институт Экспериментальной Физики САН*

*azarevich@lt.gpi.ru*

Магнитоупорядоченные соединения редкоземельных элементов с кубической кристаллической структурой нередко характеризуются сильной анизотропией магнитной фазовой диаграммы, состоящей из множества фаз с дальним магнитным порядком, переходы между которыми оказываются зависящими от величины и направления внешнего магнитного поля. Множество примеров подобного поведения имеется среди редкоземельных гекса- и додекаборидов. В работе [1] по результатам измерений угловых зависимостей магнетосопротивления (МС)  $\text{HoV}_{12}$  в магнитном поле в нескольких плоскостях вращения вектора  $\mathbf{H}$  была восстановлена трёхмерная (3D) магнитная фазовая диаграмма  $H$ - $\varphi$ - $\theta$  и продемонстрировано, что в определенных диапазонах углов, отвечающих различным магнитным фазам, наблюдается существенно различающееся по характеру магнитное рассеяние носителей заряда. Представляет интерес использовать этот подход при исследовании классического антиферромагнетика с тяжелыми фермионами- соединения  $\text{CeV}_6$ , в котором при температурах  $T < T_N \sim 2.4\text{K}$  наблюдается сложная многокомпонентная антиферромагнитная (AF) фаза, тогда как в интервале  $2.4\text{K} < T < T_Q \sim 3.3\text{K}$  регистрируется орбитально-упорядоченное, т.н., антиферроквадрупольное (AFQ) состояние. В работах [2-3] были исследованы эффекты, обусловленные анизотропией спиновых флуктуаций в AFQ фазе, описанные в терминах электронного нематического состояния. Отметим также, что  $\text{CeV}_6$  является базовым магнитным соединением для системы твёрдых растворов замещения  $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{V}_6$ , в которой с ростом концентрации лантана возникают новые необычные магнитоупорядоченные фазы, как например, фаза IV в интервале  $0.4 < x < 0.7$  [4].

В данной работе на высококачественных монокристаллических образцах были проведены измерения намагниченности и магнетосопротивления  $\text{CeV}_6$  при изменении магнитного поля по углу и абсолютной величине.



На рисунке показаны фазовые границы, восстановленные по особенностям на производной МС  $d(\Delta\rho/\rho)/dH$  при вращении образца вокруг токовой оси  $I \parallel [110]$  в схеме поперечного магнетосопротивления. Дополнительно в  $\text{CeV}_6$  нами исследовался также изотоп-эффект по бору. Для углов  $\phi$ , для которых вектор магнитного поля располагается между направлениями  $\mathbf{H} \parallel [100]$  и  $\mathbf{H} \parallel [111]$  в кубической структуре, замещение  $^{10}\text{V}$ - $^{11}\text{V}$  не повлияло на положение границ между магнитными фазами, в то время, как в окрестности  $\mathbf{H} \parallel [011]$  для кристалла  $\text{Ce}^{11}\text{V}_6$  регистрируется значительное смещение вниз по полю ориентационных фазовых переходов.

Работа выполнена при поддержке European Microkelvin Platform.

1. K.Krasikov *et al.* Phys.Rev.B, **102**, 214435, **2020**
2. S.V.Demishev *et al.* Sci. Rep, **7**, 17430, **2017**
3. A.V.Semeno *et al.* Sci. Rep., **6**, 39196, **2016**
4. T.Tayama *et al.* J. Phys. Soc. Jpn., **66**, 2268, **1997**



# ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ФАЗЫ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ПРОВОЛОКИ ПРИ УЧЕТЕ СИЛЬНЫХ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ ЗАРЯДОВЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

Аксенов С. В., Шустин М. С.

*Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, asv86@iph.krasn.ru*

Имеющиеся эксперименты с гибридными сверхпроводящими проволоками, которые характеризуются наличием сильной спин-орбитальной связи и большими значениями  $g$ -фактора, не позволяют однозначно определить реализуются ли на концах этой структуры самосопряженные моды майорановского типа [1]. В результате возникает потребность в более детальном изучении явления топологической сверхпроводимости и свойств майорановских связанных состояний (МСС). Поскольку с одной стороны экранировка заряженных частиц полупроводниковой проволоки за счет сверхпроводящей оболочки в общем случае не является полной, а с другой – была показана возможность контроля величины кулоновского взаимодействия в проволоке действием электрического поля электродов затвора [2], то проблема влияния процессов зарядового отталкивания на МСС представляется актуальной.

В исследовании [3] основное внимание уделялось проблеме сильного хаббардовского отталкивания. В настоящей работе с помощью численного алгоритма DMRG рассматривается вопрос о влиянии сильного межузельного отталкивания электронов с интенсивностью  $V$  на топологические свойства сверхпроводящей проволоки симметричного класса BDI [4]. Последнее означает наличие нескольких нетривиальных фаз: фазы с одной парой майорановских мод (аналогично гамильтониану класса D) и фазы с двумя МСС. Данные фазы хорошо видны на зависимости первых двух энергий возбуждения от химпотенциала,  $\mu$ , приведенной на рис. 1а в режиме сильного хаббардовского взаимодействия при  $V=0$ . Рассматриваемый диапазон значений  $\mu$  включает всю нижнюю зону Хаббарда, т.е. при  $\mu=-2$  средняя концентрация,  $\langle n \rangle$ , равна 0 (см. кривую с маркерами-треугольниками и правую ось  $y$ ). В свою очередь,  $\langle n \rangle=1$  при  $\mu=1.5$ . Для  $\mu > 1$  реализуется мотт-хаббардовская щель. Внутри самой зоны выделяются три области с отличающимися топологическими фазами: 1) тривиальная фаза при  $\mu \in [-2; -1.7]$ ; 2) нетривиальная фаза с двумя майорановскими состояниями при  $\mu \in [-1.7; -1.2]$ ; 3) нетривиальная фаза с одним майорановским состоянием

при  $\mu \in [-1.2; 1]$ . Наличие последних двух фаз следует из того, что значения соответствующих энергий возбуждения обращаются в нуль.

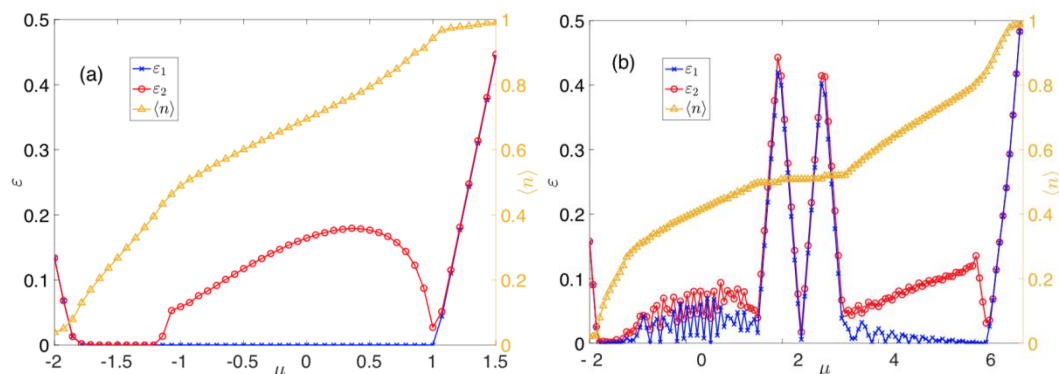


Рисунок 1. Зависимость первых двух энергий возбуждения и средней концентрации от химического потенциала: (a)  $V=0$ , (b)  $V=3.5$ .

На рис. 1b показано влияние сильных межузельных кулоновских корреляций на энергии возбуждения и среднюю одноузельную концентрацию в нижней хаббардовской зоне. Видно, что при большом  $V$  внутри нее образуются две подзоны при  $\mu \in [-2; 1.5]$  и  $\mu \in [3; 7]$ . В щели между ними концентрация выходит на плато, где  $\langle n \rangle = 0.5$  (см. кривую с треугольными маркерами и ось ординат справа). С ростом  $V$  топологическая фаза с одним майорановским состоянием начинает быстро подавляться для большинства значений  $\mu$ . Как видно, при  $\mu \in [-1.9; -1.5]$  и  $\mu \in [4; 6]$  реализация одиночных МСС остается возможной. Такую устойчивость топологических фаз по отношению к сильным межузельным зарядовым корреляциям можно объяснить тем, что отмеченные области химического потенциала характеризуются малой концентрацией электронов или дырок, и, соответственно, относительно слабым влиянием межузельного отталкивания на свойства системы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 19-02-00348), Правительства Красноярского края и Краевого фонда науки (проекты № 20-42-243001, 20-42-243005). ШМС выражает благодарность Фонду развития теоретической физики и математики «БАЗИС». АСВ благодарит за поддержку грант Президента РФ МК-1641.2020.2.

## Литература

1. H. Pan et al., Phys. Rev. B 101, 024506, **2020**
2. Y. Sato et al., Phys. Rev. B 99, 155304, **2019**
3. S.V. Aksenov et al., Phys. Rev. B 101, 125431 [SEP] **2020**
4. М.С. Шустин, С.В. Аксенов, ФТТ 63, 1758, **2021**

# СИЛЬНО ВЯЗКАЯ ДВУМЕРНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ЖИДКОСТЬ В GaAs КВАНТОВЫХ ЯМАХ С ВЫСОКОЙ ПОДВИЖНОСТЬЮ

Алексеев П. С., Алексеева А. П.  
ФТИ им. А. Ф. Иоффе, С.-Петербург, Россия  
[pavel.alekseev@mail.ioffe.ru](mailto:pavel.alekseev@mail.ioffe.ru)

В проводниках с малой плотностью дефектов межэлектронные столкновения могут приводить к формированию вязкой электронной жидкости [1]. Такая жидкость была недавно обнаружена в высокоподвижных образцах графена, вейлевских металлов и GaAs квантовых ям (см., например, обзор литературы в работе [2]).

В ферми-жидкости при низких температурах могут распространяться быстрые продольные волны: нулевой звук для незаряженной жидкости и плазмоны для случая электронной жидкости. При достаточно сильном межчастичном взаимодействии становится также возможно распространение поперечных волн сдвиговой деформации [3], характерных для аморфных твёрдых тел. Теория поперечных волн в двумерной сильно неидеальной (сильно вязкой) электронной жидкости развита в работах [4-6]. Было показано, что в пределе очень большой силы межчастичного взаимодействия такие волны описываются гидродинамически: уравнениями типа Навье-Стокса с высокочастотными комплексными коэффициентами вязкости [5]. Характерной особенностью заряженной сильно вязкой ферми-жидкости является *магнитный вязкоупругий резонанс* в коэффициентах вязкости [2] и в соответствующем им законе дисперсии поперечных волн [5,6]. При частотах много выше частоты межчастичных столкновений динамика жидкости вдали от резонанса является почти упругой, межчастичные столкновения определяют медленную релаксацию и уравнения гидродинамики становятся близки к уравнения Гука упругой среды.

В работе [6] рассчитан линейный отклик сильно вязкой электронной жидкости в длинном образце на радиочастотное излучение. Показано, что поперечные магнитозвуковые волны образуют течение вблизи краёв образца и приводят к особенностям отклика на частоте вязкоупругого резонанса, равной удвоенной циклотронной частоте электронов. Была выдвинута гипотеза о том, что формирование описанного течения электронной жидкости объясняет гигантский пик в фотосопротивлении, наблюдавшийся в наиболее чистых GaAs квантовых ямах в магнитном поле.

В работе [7] была развита теория нелинейного магнетотранспорта в сильно вязкой электронной жидкости в области почти упругой динамики высокочастотной компоненты течения (вдали от вязкоупругого резонанса). Показано, что учёт эффектов памяти при столкновениях квазичастиц ферми-жидкости в магнитном поле приводит к запаздывающей релаксации тензора вязких напряжений жидкости. Скорость такой релаксации зависит от амплитуды и профиля течения. Рассчитано фотосопротивление жидкости, обусловленное этим эффектом. Полученные осцилляции фотосопротивления с магнитным полем контролируются отношением длины волны магнитозвука к ширине образца и совпадают по многим свойствам с наблюдаемыми осцилляциями фотосопротивления GaAs квантовых ям в неквантовых магнитных полях (эффект MIRO).

Теория [7] недавно была расширена также на диапазон частот вблизи вязкоупругого резонанса, где межчастичные столкновения вносят определяющий вклад в формирование высокочастотной компоненты течения. Расширение основано на учёте влияния эффектов памяти при столкновениях квазичастиц не только на релаксацию, но и на энергию взаимодействия квазичастиц. Соответствующее запаздывающее слагаемое в уравнениях эволюции сдвиговых напряжений приводит к осцилляциям фотосопротивления похожим на те, к которым приводит учёт эффектов памяти в релаксации [7]. Однако, фотосопротивление за счёт возмущения энергии взаимодействия квазичастиц, кроме осцилляций, имеет асимметричную резонансную особенность на частоте вязкоупругого резонанса. По-видимому, полученные результаты дают конкретный микроскопический механизм пика в фотосопротивлении двумерной электронной жидкости, который наблюдался в высокподвижных GaAs квантовых ямах и был качественно объяснён в работе [6].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-72-10111.

## Литература

1. Р. Н. Гуржи, УФН, **94**, 689, **1968**
2. P. S. Alekseev, Phys. Rev. B, **98**, 165440, **2018**
3. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Статистическая физика, часть 2: Теория конденсированного состояния (Москва, Физматлит, 2004)
4. S. Conti, G. Vignale, Phys. Rev. B, **60**, 7966, **1999**
5. П. С. Алексеев, ФТП, **53**, 1405, **2019**

## РОСТ КРИСТАЛЛОВ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИНГОНИИ В МОДЕЛИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПОЛЯ

Анкудинов В. Е.

*Институт физики высоких давлений*

*им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва*

*vladimir@ankudinov.org*

В работе рассмотрена модель кристаллического фазового поля (КФП, phase-field crystal), сформулированная для описания переходов из однородного состояния в периодическое кристаллическое (аналогично переходам Ландау-Бразовского), а также между различными периодическими состояниями на временах, сопоставимых с диффузионными [1, 2]. Модель КФП – континуальная атомистическая модель, основанная на описании свободной энергии в виде функционала поля атомной плотности периодического в твердой фазе и однородного в жидкой.

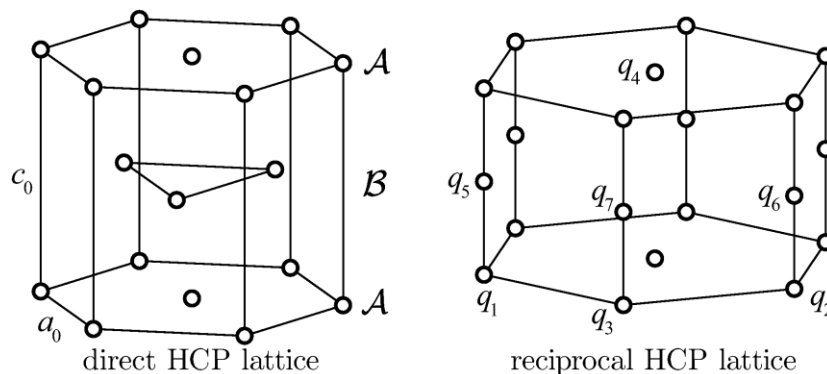


Рис. 1. Схематическое изображение гексагональной плотнейшей упаковки (ГПУ) и её обратной решетки, позволяющее определить минимальный набор необходимых для её построения векторов.

При амплитудном разложении в модели КФП не существует однозначной записи периодического решения для гексагональных кристаллов, что приводит к трудностям при попытках воспроизвести кристаллы гексагональной сингонии. В данной работе будет продемонстрирован подход, позволяющий с помощью введения разложения обменной энергии более высоких порядков, описать как

простую гексагональную решетку (ПГ), так и ГПУ. В дальнейшем, для ПГ и ГПУ решеток будут рассчитаны структурные диаграммы сосуществования фаз и приведены скорости роста таких решеток на основе упрощенного решения амплитудного уравнения КФП.

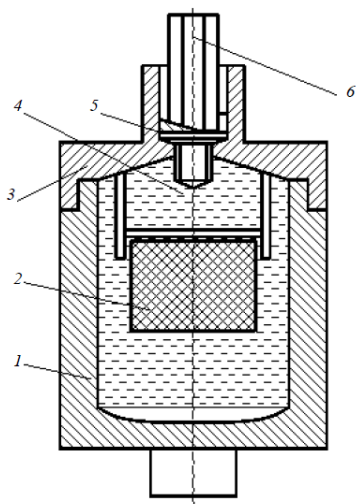
Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант РФФ № 18-12-00438).

## Литература

1. N. Provatas, K. Elder, Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering, 312 с., **2010**
2. V. Anukudinov et al. Phase Field Crystals: Fast Interface Dynamics, 135 с., **2018**

## СПОСОБ ПРОПИТКИ ГРАФИТА МЕТАЛЛАМИ

### ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ



Антанович А.А.

*ФГБУН Институт физики высоких давлений  
имени Л.Ф. Верецагина Российской академии  
наук, Москва, Россия*

[antanov@hppi.troitsk.ru](mailto:antanov@hppi.troitsk.ru)

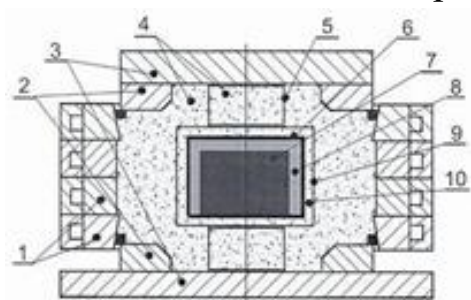
Графит, пропитанный металлами и сочетающий индивидуальные свойства компонент, находит применение в технических устройствах на

электротранспорте, в машиностроении и атомной энергетике.

Наиболее эффективным способом получения таких композитов является жидкофазная пропитка графита металлами под давлением. Для реализации этого способа используются различные устройства, суть которых состоит в погружении заготовки графита целиком в расплав металла и воздействии на расплавленный металл высоким давлением. Одно из таких устройств показано на первом рисунке.. Заготовка графита 2, погруженная в расплав металла 4, помещена в толстостенный стакан 1 с уплотняющими элементами 3, 5, 6. Давление пропитки создается за счет термического расширения пропитываемого металла при его существенном перегреве выше

температуры плавления. В этом, как и в других устройствах создаются давления не выше  $\sim 15$  МПа, что не позволяет заполнить мелкие поры графита. Кроме того, известные способы требуют неоправданно большие количества пропитывающего металла. Например, в описанном устройстве для пропитки свинцом графитовой заготовки объемом  $100 \text{ см}^3$  с открытой пористостью 18% потребовался стакан объемом  $3000 \text{ см}^3$  и, соответственно,  $\sim 33$  килограмма свинца, тогда как для заполнения открытых пор графитовой заготовки необходимо всего около 200 грамм свинца.

В тоже время нами достаточно давно был разработан и внедрен в серийное производство способ получения углерод-углеродных композиционных материалов, в котором в качестве одной из



основных технологических операций является пропитка углеродного каркаса жидкими углеводородами (обычно каменноугольными пеками) и их карбонизация под высоким давлением. Для проведения указанной технологической операции был

разработан аппарат высокого давления типа «цилиндр-поршень», показанный на втором рисунке, в котором в качестве среды, передающей давление, используется обычный кварцевый песок, а углеродный каркас и расчетное потребное количество каменноугольного пека размещаются в герметичном контейнере в центре аппарата высокого давления. Нагрев контейнера осуществляется с помощью ленточного нагревателя сопротивления, а усилие на поршни аппарата создается с помощью гидравлического пресса.

Мы применили такой аппарат для пропитки графита свинцом и алюминием. Первоначально тонкостенный контейнер с графитом и расчетным количеством металла помещался в вакуумную печь, нагревался до температуры выше температуры плавления металла, после остывания герметизировался и помещался в аппарат высокого давления. После достижения в контейнере необходимой температуры создавалось требуемое давление и происходила пропитка графита расплавленным металлом в условиях полной гидростатики.

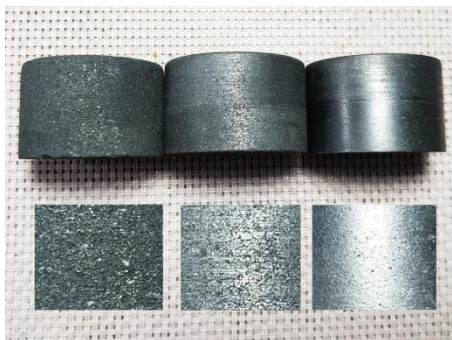


В качестве примера на третьем рисунке приведены фотографии внешнего вида графита (слева) и двух композитов на основе свинца с различной пористостью, а также текстуры боковых поверхностей этих материалов. Из рисунка видно, как с увеличением плотности композита появляется металлический блеск на обработанных поверхностях композита.

Описанный способ пропитки позволяет многократно сократить количество матричного металла, расширить круг типоразмеров образцов и использовать для пропитки более тугоплавкие металлы.

## Литература

1. А.А. Антанович, О.А. Воронов, В.А. Давыдов и др., Патент РФ № 2119469, **1998**
2. А.А. Антанович. *Материалы. Технологии. Инструменты.*, **14**, 4, С. 78-81, **2009**



## ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ ГАЗА НА ДИФФУЗИЮ ГАЗОНАПОЛНЕННЫХ ПУЗЫРЕЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Антропов А.С.<sup>1,2</sup>, Стегайлов В.В.<sup>1,2,3</sup>

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

<sup>2</sup>*Московский Физико-Технический*

*Институт (национальный исследовательский университет)*

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

*antropov@phystech.edu*

Несмотря на большое количество работ по диффузии газовых пузырей в кристаллических решетках, однозначной модели, которая могла бы предсказывать коэффициент диффузии в широком диапазоне размеров, температур и концентраций газа, пока не существует. Об этом свидетельствуют расхождения в результатах экспериментальных данных и численных расчетов по существующим



теориям [1]. Одним из факторов подавления диффузии полостей является давление газа внутри. Коэффициент диффузии сильно сжатых газонаполненных пузырей может уменьшаться более чем на 10 порядков по сравнению с пустыми полостями.

В работе методами молекулярно-динамического моделирования исследуется влияние газа на кинетику процессов на поверхности пузыря и на коэффициент диффузии пузыря. Рассмотрены пузыри ксенона в диоксиде урана [2] и пузыри гелия в алюминии [3]. Рассчитаны коэффициенты поверхностной самодиффузии по различным поверхностям пузырей, а также энергии образования ступеней на устойчивых гранях при разных концентрациях газа. Также рассчитаны коэффициенты диффузии нанопузырей радиусом от 0.6 до 2 нм). Используется как непосредственное моделирование Броуновского движения пузырей, так и ускоренный метод моделирования дрейфа в градиенте давления.

В результате работы получена зависимость коэффициентов поверхностной самодиффузии и скорости других кинетических процессов на поверхности от давления газа для диоксида урана и алюминия. Полученные результаты дают возможность сравнить предсказания континуальной теории диффузии пузырей и теории нуклеации террас с экспериментальными данными.

Также в работе показано, что газонаполненные пузырьки в диоксиде урана  $R \sim 0.6$  нм могут быть устойчивыми при очень больших концентрациях газа (соотношение атомов газа к вакансиям в урановой подрешетке  $> 2$ ). Устойчивая структура таких пузырьков достигается после релаксации в течении 0.5-1 мкс из сферически симметричной начальной структуры и характеризуется возникновением кластера урановых междоузлий рядом с нанопузырьком. Особенности динамики подобного кластера урановых междоузлий, примыкающего к нанопузырьку, повышают скорость диффузии нанопузырька более, чем на 10 порядков по сравнению с предсказаниями теорий. Этот эффект может служить объяснением аномально высокого выхода газа из образца в некоторых экспериментах.

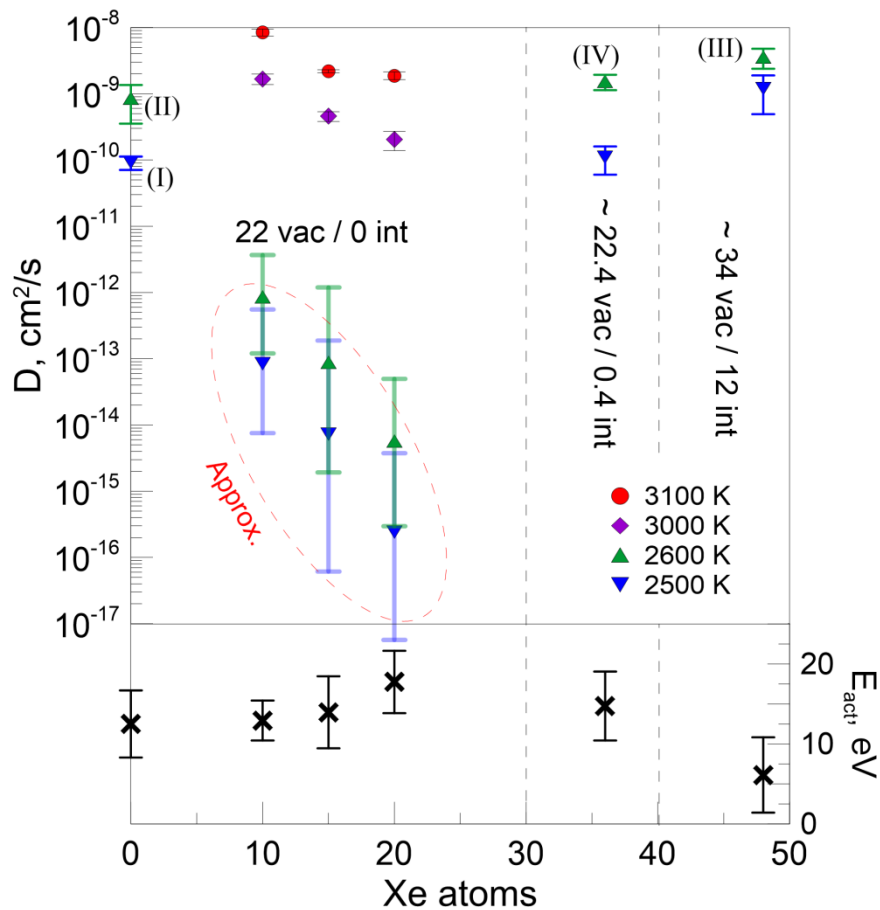


Рис 1. Коэффициент диффузии пузырька из 22 вакансий в зависимости от количества газа внутри. Для высоких концентраций показаны конечное среднее количество вакансий и междоузлий в кластере.

### Литература

1. L. Verma, L. Noirot, P. Maugis. J. Nucl. Mater., **528**, 151874, **2019**
2. A. Antropov, V. Stegailov. J. Nucl. Mater., **551**, 152942, **2021**
3. А. С. Антропов. Письма в ЖЭТФ, **112**, 325-331, **2020**

# СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ЯДРО-ОБОЛОЧКА В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ

Баграмов Р. Х.

*ИФВД РАН, 108840 Москва, г. Троицк, Калужское шоссе 14  
bagramov@hppi.troitsk.ru*

Как правило, наночастицы различных веществ и соединений чрезвычайно химически и физически активны. Это предъявляет особые требования к их защите от окружающей среды. Особый интерес представляют методы синтеза защищенных наночастиц со структурой «углеродное ядро + углеродная оболочка» [1]. Углеродные слои оболочек стабилизируют и защищают наночастицы-ядра, при этом они инертнее, экологически безопаснее и часто более «биологически совместимы», чем ряд других материалов.

Высокие давления – уникальный инструмент, позволяющий получать новые фазы и состояния веществ [2]. Однако можно найти лишь отдельные работы, посвященные синтезу в условиях высоких давлений наночастиц ядро-оболочка [3, 4]. Настоящая работа посвящена синтезу защищенных наночастиц карбидов и нитридов железа.

В качестве исходных были выбраны ферроцен  $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$  (99%, Sigma-Aldrich) и меламин  $\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6$  (98%, Sigma-Aldrich). Для ряда экспериментов готовилась смесь  $82\%_{\text{вес}}\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2 + 18\%_{\text{вес}}\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6$ , которая смешивалась в агатовой ступке с добавлением бензола и наложением ультразвука. Смесь сушили на воздухе при  $50^\circ\text{C}$ . Эксперименты при высоких давлениях проводились в камере «тороид» [5]. Калибровка давления проводилась (при комнатной температуре) с использованием общепринятой методики по фазовым переходам эталонных веществ [6]. Температура измерялась термопарами.

Наночастицы «ядро-оболочка» были получены из ферроцена и смеси ферроцен-меламин при давлениях 2, 4 и 8 ГПа. При синтезе из ферроцена при температуре  $800^\circ\text{C}$  в течение 30 минут в образцах, полученных при 2 и 4 ГПа, присутствовал только карбид железа  $\text{Fe}_3\text{C}$ . При этом в образце, полученном при 8 ГПа, присутствовал только карбид  $\text{Fe}_7\text{C}_3$ .

При синтезе из смеси  $82\%_{\text{вес}}\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2 + 18\%_{\text{вес}}\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6$  при температуре  $800^\circ\text{C}$  в течение 30 минут при всех давлениях (2÷8 ГПа) доминирующей фазой была  $\text{Fe}_3\text{N}$ . При этом полученный при 4 ГПа

образец содержал только ее, а образец, полученный при 8 ГПа, содержал небольшое (<15%) количество карбида железа  $Fe_7C_3$ .

Все полученные наночастицы типа ядро-оболочка имели узкий диапазон распределения по размерам и были внедрены в углеродную матрицу (Рисунок). При этом оболочка представляла собой слои, уложенные по принципу «луковица».

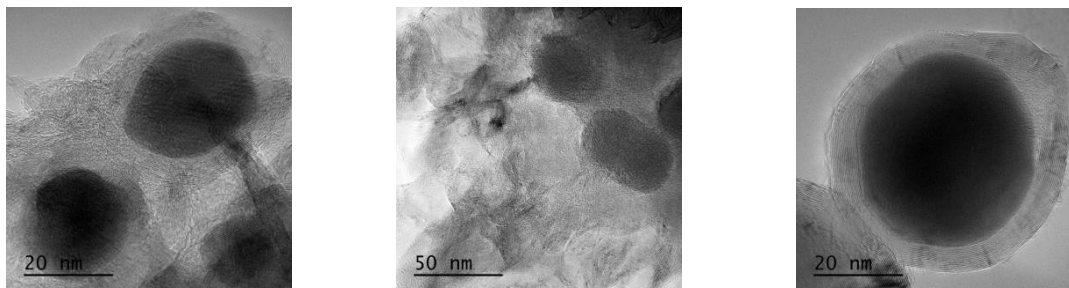


Рисунок. ПЭМ изображения образца, полученного из смеси феррофен+меламин при 4 ГПа.

Полученные результаты свидетельствуют о повышении термодинамической стабильности при 4 ГПа в ряду  $Fe_7C_3 < Fe_3C < Fe_3N$ , а при 8 ГПа в ряду  $Fe_3C < Fe_7C_3 < Fe_3N$ .

Материалы «ядро-оболочка», где ядро представляет собой карбид или нитрид железа, могут быть использованы в устройствах холодной эмиссии, как прекурсоры при росте нанотруб и нанофиберов, как контрастные вещества для ЯМР анализа, для катализа, как вещества для сверхплотной магнитной записи информации, для получения магнитных жидкостей, а также таких приложениях, как биомедицина, фото- и электро- катализ.

Таким образом, показано, что метод высоких давлений и температур может эффективно использоваться для синтеза наночастиц «ядро-оболочка», и, в отличие от других методов, позволяет целенаправленно менять фазовый состав наночастиц.

## Литература

1. V. G. Pol, et.al., Carbon Sci. Technol., **1**, 46-56, **2008**
2. E. Yu. Tonkov, High Pressure Phase Transformations. A Handbook. Gordon and Breach Publishers, Switzerland. Vols 1-6, **1992–1996**.
3. R. N. Bagramov, et.al., Fullerene Sci. Technol., **20**, 41–48, **2012**
4. V. A. Davydov, et.al., J. Mater. Chem. B, **2**, 4250–4261, **201**
5. L. G. Khvostantsev, et.al., High Pressure Research, **3**, 371–383, **2004**
6. D. L. Decker, et.al., J. Phys. Chem. Ref. Data, **1**, 1–79, **1972**

# ПЕРЕХОД ЛЬДА XVII В КУБИЧЕСКИЙ И ГЕКСАГОНАЛЬНЫЙ ЛЕД В МОДЕЛИ TIP4P/ICE

Барсегян А.Т.<sup>1</sup>, Стегайлов В.В.<sup>1,2,3</sup>

<sup>2</sup>*Московский Физико-Технический Институт (национальный исследовательский университет)*

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

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

[barseghyan.at@phystech.edu](mailto:barseghyan.at@phystech.edu)

В зависимости от температуры и давления твердая фаза воды имеет более чем 17 морфологически отличающиеся фаз. В 2016 году del Rosso с коллегами [1] смогли полностью опустошить C0 фазу клатратного гидрата водорода и определили полученную структуру как 17-ю форму льда. Уже в 2011 году Ефимченко с коллегами [2] показали, что при нагревании опустошенной структуры можно получить кубический лед. А в 2020 году del Rosso с коллегами [3] описали метод, с помощью которого наблюдалось образование чистого кубического льда.

Несмотря на простую химическую формулу воды, до сих пор нет такой модели, с помощью которого можно было полностью описать свойства воды в широком диапазоне давлений и температур. Известно, что модель TIP4P/ICE с высокой точностью описывает разные свойства льда. В данной работе методами молекулярной динамики обнаружен фазовый переход льда XVII в кубический или гексагональный лед. Был показан механизм фазового перехода. В зависимости от температуры была получена вероятность образования кубического или гексагонального льдов. Были посчитаны скорости образования кубического льда на льде XVII и плавление льда XVII для разных температур при нулевом давлении. Была оценена экспериментальная микроскопическая скорость образования кубического льда, что соответствует полученным результатам моделирования.

## Литература

1. L. Del Rosso et al., Nat. Commun., **7**, 13394, **2016**
2. V. S. Efimchenko et al., J. Alloys Compd., **509**, 860, **2011**
3. L. del Rosso et al., Nat. Mater., **19**, 663, **2020**

## ОСОБЕННОСТИ МИКРОСКОПИЧЕСКОГО ВЫВОДА УРАВНЕНИЯ ГИНЗБУРГА-ЛАНДАУ В НЕСТАЦИОНАРНОМ СЛУЧАЕ

Билинский Ю.М.<sup>1,2</sup>, Арсеев П.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук

<sup>2</sup>Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования «Московский физико-технический  
институт (национальный исследовательский университет)»

*yu.bilinsky@yandex.ru*

В работе рассматриваются сверхпроводники при температурах, близких к критическим, помещенные во внешнее электромагнитное поле. Известно, что в случае, когда  $T \sim T_c$ , и система помещена в постоянное во времени магнитное поле, её можно описывать с помощью уравнения Гинзбурга-Ландау [1]:

$$K \left( -i\nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \Delta(\mathbf{r}) + A\Delta(\mathbf{r}) + B|\Delta(\mathbf{r})|^2 \Delta(\mathbf{r}) = 0. \quad (1)$$

Здесь  $A, B, K$  – некоторые размерные параметры системы. Это уравнение является прямым следствием уравнения самосогласования на параметр порядка  $\Delta(\mathbf{r})$ , которое мы можем записать в терминах аномальной функции Грина  $F^<(r, t; r', t')$ :

$$\Delta(\mathbf{r}, t) = gF^<(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}, t). \quad (2)$$

В случае, когда  $T \sim T_c$ , мы имеем право раскладывать правую часть этого уравнения по  $\Delta(r, t)$ , откуда в случае, когда внешнее поле описывается постоянным во времени векторным потенциалом  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ , мы получаем уравнение (1). Однако в более общем случае такое разложение встречает ряд трудностей [2].

Обратим внимание, что, как правило, в задачах, в которых описывается отклик сверхпроводящих систем на внешнее поле, поведение модуля и фазы параметра порядка имеет смысл рассматривать по-отдельности. Заметим, что если комплексную величину  $\Delta(\mathbf{r}, t)$  записать в виде  $\Delta(\mathbf{r}, t) = \Delta_0(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$ , то уравнение (1) можно переписать в виде системы двух уравнений на действительную и мнимую часть:

$$\begin{aligned} -\nabla^2 \Delta_0(\mathbf{r}) + \left( \nabla\theta(\mathbf{r}) - \frac{2e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \Delta_0(\mathbf{r}) + \frac{A}{K} \Delta_0(\mathbf{r}) + \frac{B}{K} |\Delta_0(\mathbf{r})|^2 \Delta_0(\mathbf{r}) \\ = 0, \end{aligned}$$

$$\nabla^2 \theta(\mathbf{r}) - \frac{2e}{c} (\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})) + 2 \left( \nabla \theta(\mathbf{r}, t) - \frac{2e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \frac{\nabla \Delta_0(\mathbf{r})}{\Delta_0(\mathbf{r})} = 0.$$

В случае, когда внешние поля  $\phi(\mathbf{r}, t)$ ,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  зависят от времени, имеет смысл искать уравнения в калибровочно-инвариантном виде, чтобы нам не приходилось проверять, выполняется ли уравнение непрерывности для заряда. Для этого совершается калибровочное преобразование

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{c}{2e} \nabla \theta(\mathbf{r}, t), \quad \phi'(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2e} \frac{\partial \theta(\mathbf{r}, t)}{\partial t}.$$

В этом случае параметр порядка является действительным. Если использовать уравнение (2) для получения зависимости параметра порядка от преобразованных полей

$$\Delta(r, t) = R[\phi'(\mathbf{r}, t), \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t), \Delta(\mathbf{r}, t)], \quad (3)$$

то условие действительности параметра порядка дает условие на фазу параметра порядка:

$$0 = \text{Im} R \left[ \phi(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2e} \frac{\partial \theta(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{c}{2e} \nabla \theta(\mathbf{r}, t), \Delta(\mathbf{r}, t) \right].$$

После этого мы можем получить условие на модуль параметра порядка подстановкой результата в (3).

В этой работе мы получили выражение для функции  $R$  из микроскопического подхода. В дальнейшем мы планируем исследовать, как калибровочно-инвариантный отклик сверхпроводников описывается с помощью системы уравнений Гинзбурга-Ландау для фазы и модуля параметра порядка.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 20-02-00352).

## Литература

1. В.Л. Гинзбург, Л.Д. Ландау, ЖЭТФ, **20**, 1064, **1950**
2. Л.П. Горьков, Г.М. Элиашберг, ЖЭТФ, **54**, 612, **1968**

## ФАЗОВЫЕ СООТНОШЕНИЯ В БОРСОДЕРЖАЩИХ СИСТЕМАХ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ

<sup>1,2</sup>Беккер Т.Б., <sup>1,2</sup>Сагатов Н.Е., <sup>1,2</sup>Подбородников И.В., <sup>3</sup>Литасов К.Д.

<sup>1</sup>*Институт геологии и минералогии СО РАН*

<sup>2</sup>*Новосибирский государственный университет*

<sup>3</sup>*Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН*

*t.b.bekker@gmail.com*

Изучение высокотемпературных боратных систем – интенсивно развивающаяся область науки на стыке кристаллохимии и материаловедения. В настоящее время бораты являются не имеющими альтернативы кристаллическими средами для нелинейно-оптического преобразования лазерного излучения в область ближнего и вакуумного ультрафиолета, являются основными компонентами поляризационной оптики УФ диапазона. Связано это с удачным сочетанием свойств боратов, а именно, широким диапазоном прозрачности, высоким порогом интенсивности разрушающего излучения, двулучепреломлением, приемлемыми значениями нелинейно-оптических коэффициентов. Это класс соединений, который может соперничать с силикатами по разнообразию структурных мотивов. Обусловлено это тем, что бор может находиться в оксидных соединениях как в тройной координации, так и в четверной, а также в той и другой совместно.

В то время как высокотемпературная кристаллохимия боратов изучена достаточно детально [1], высокобарическая кристаллохимия боратов остается практически неисследованной. В настоящее время систематическое экспериментальное изучение боратов, полученных при высоких давлениях и температурах, проводится австрийским коллективом под руководством профессора Хуберта Хуппертца [2] с использованием многопуансонного аппарата Walker-типа. Коллективом открыто более 30 новых борсодержащих соединений с принципиально новым типом структур, изучены свойства.

Объектом настоящих исследований является система ВаО-В<sub>2</sub>О<sub>3</sub>-ВаF<sub>2</sub>, в которой кристаллизуется важнейший нелинейно-оптический борат β-ВаВ<sub>2</sub>О<sub>4</sub>. При исследовании фазовых равновесий в системе были открыты твердые растворы с антицеолитной структурой Ва<sub>7</sub>(ВО<sub>3</sub>)<sub>4-x</sub>F<sub>2+3x</sub> [3,4] и Ва<sub>3</sub>(ВО<sub>3</sub>)<sub>2-x</sub>F<sub>3x</sub> [5,6]. В структурах фаз можно



выделить положительно заряженный каркас, вмещающий разупорядоченные анионные кластеры [7].

С использованием теории функционала плотности проведены расчеты устойчивости структур соединений подсистем ВаО–В<sub>2</sub>О<sub>3</sub> и ВаF<sub>2</sub>–Ва<sub>3</sub>В<sub>2</sub>О<sub>6</sub> в диапазоне давлений до 10 ГПа. Согласно результатам расчетов, в подсистеме ВаО – В<sub>2</sub>О<sub>3</sub> фазы Ва<sub>3</sub>В<sub>2</sub>О<sub>6</sub>, ВаВ<sub>2</sub>О<sub>4</sub>, и ВаВ<sub>4</sub>О<sub>7</sub> стабильны при давлении до 10 ГПа, в то время как другие известные при атмосферном давлении фазы, Ва<sub>5</sub>В<sub>4</sub>О<sub>11</sub>, Ва<sub>2</sub>В<sub>6</sub>О<sub>11</sub>, и ВаВ<sub>8</sub>О<sub>13</sub>, разлагаются под давлением выше 7.1, 0.6 и 2.0 ГПа, соответственно. Предсказаны две новые полиморфные модификации метабората бария ВаВ<sub>2</sub>О<sub>4</sub>, ВаВ<sub>2</sub>О<sub>4</sub>-*Pna*2<sub>1</sub> и ВаВ<sub>2</sub>О<sub>4</sub>-*Pa* $\bar{3}$ , стабильные выше 1.0 и 6.1 ГПа, соответственно. В подсистеме ВаF<sub>2</sub>–Ва<sub>3</sub>В<sub>2</sub>О<sub>6</sub> твердый раствор Ва<sub>7</sub>(ВО<sub>3</sub>)<sub>4-x</sub>F<sub>2+3x</sub> устойчив в рассматриваемом диапазоне давлений, а фаза Ва<sub>5</sub>(ВО<sub>3</sub>)<sub>3</sub>F разлагается на Ва<sub>3</sub>В<sub>2</sub>О<sub>6</sub> и Ва<sub>7</sub>(ВО<sub>3</sub>)<sub>4-x</sub>F<sub>2+3x</sub> при давлениях выше 3–5 ГПа. Показано, что энтальпия твердого раствора Ва<sub>7</sub>(ВО<sub>3</sub>)<sub>4-x</sub>F<sub>2+3x</sub> зависит от распределения анионных групп [(ВО<sub>3</sub>)F]<sup>4-</sup> и [F<sub>4</sub>]<sup>4-</sup> в структуре.

Проведены первые эксперименты по синтезу боратов в подсистемах ВаО–В<sub>2</sub>О<sub>3</sub> и ВаF<sub>2</sub>–Ва<sub>3</sub>В<sub>2</sub>О<sub>6</sub> на многопуансонном гидравлическом прессе «Discoverer-1500» DIA-типа при давлениях 3 и 6 ГПа, и температурах 1000 и 1100 °С. Образцы исследованы с использованием сканирующей электронной микроскопии с энергодисперсионной рентгеновской спектроскопией, комбинационного рассеяния света.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ 21-19-00097.

## Литература

1. Бубнова Р. С., Филатов С. К. **Высокотемпературная кристаллохимия боратов и боросиликатов. – 2008**
2. Vitzthum D. et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **57**, 35, **2018**
3. Bekker T. B. et al., *CrystEngComm.*, **14**, 20, **2012**
4. Bekker T.B. et al., *Cryst. Growth Des.*, **16**, 8, **2016**
5. Rashchenko S. V. et al., *J. Alloys Compd.*, **694**, **2017**
6. Bekker T.B. et al., *J. Am. Ceram. Soc.*, **101**, 1, **2018**
7. Bekker T.B. et al., *Inorg. Chem.*, **59**, 18, **2020**

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ РАСПЛАВА В УСЛОВИЯХ КОНКУРЕНЦИИ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И АМОРФНОЙ СТРУКТУР

Васин М.Г.<sup>1</sup>, Анкудинов В.Е.<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup>УдмФИЦ УрО РАН

*dr\_vasin@mail.ru*

Предложена теоретическая модель, описывающая затвердевание расплава в условиях конкуренции двух низкотемпературных фаз, одна из которых представляет собой неупорядоченную систему топологически устойчивых возбуждений (вихрей), а вторая - упорядоченную (кристаллическую) фазу. Модель основана на методе фазового поля и калибровочной теории стеклования.

В работе была выведена общая форма стохастических динамических уравнений системы для описания быстрого затвердевания с конкурирующим образованием аморфной и кристаллической фаз. Численное исследование продемонстрировало принципиальную возможность использования довольно простой мягкой модели, основанной на методе фазового поля [1] и калибровочной теории стеклования [2], для описания затвердевания в условиях конкуренции между процессами кристаллизации и аморфизации. Хотя представленная модель основана на теории непрерывного фазового перехода из неупорядоченной фазы в упорядоченную, данная формулировка позволяет в дальнейшем распространить эту модель на случай фазовых переходов первого рода. Однако даже в таком упрощённом представлении модель описывает ключевые особенности кинетики конкуренции состояний порядка и беспорядка. Важным результатом является то, что скорость охлаждения оказывает существенное влияние на формирование фаз. Расчёты, выполненные в рамках предложенной модели, показали, что затвердевание при быстром охлаждении приводит к преобладающему формированию неупорядоченной фазы, затем последующая эволюция приводит к старению до упорядоченной низкотемпературной фазы. Также было показано, что дальнейшее охлаждение приводит к спинодальному распаду, а подвижность фаз играет значительную роль в динамике миграции дефектов. Это хорошо согласуется с

наблюдаемой кинетикой фазовых переходов в реальных стеклообразующих системах, и позволяет сделать вывод, что данная модель правильно учитывает связь между полями, описывающими упорядоченные и неупорядоченные низкотемпературные фазы.

Недостатком рассмотренной модели является наблюдаемая в ней аррениусовская релаксация низкотемпературной неупорядоченной фазы. Это не соответствует экспериментально наблюдаемому неаррениусовскому релаксационному поведению в металлических переохлаждённых жидкостях и стёклах. По-видимому, этот недостаток связан с пренебрежением влияния на процесс кристаллизации диффузионных процессов. Известно, что релаксационные процессы старения и кристаллизации стекла зависят от кинетики изменения их химического состава, замедление которых в нашей модели не учитывается. Таким образом, мы ожидаем, что добавление уравнения диффузии к предложенной здесь модели позволит получить более адекватное описание кинетики затвердевания.

Формулировка модели выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта "Релаксация в жидких эвтектических стеклообразующих системах" № 21-13-00202. Численные расчеты были поддержаны проектом RnD "Искусственный интеллект в разработке, обучении и обслуживании экспертных систем для использования знаний в естественных, технических и гуманитарных науках" АААА-А19-119092690104-4 Удмуртского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук.

## Литература

1. N. Provatas, K. Elder, Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. Wiley-VCH, **2010**
2. M.G. Vasin, V.M. Vinokur, Physica A 525 1161, **2019**

## ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ БАРИЕМ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ ПЕРОВСКИТА $GdMnO_3$

Ведмидь Л.Б., Федорова О.М.

*Institute of Metallurgy UB RAS, Yekaterinburg, Russia,*

[elarisa100@mail.ru](mailto:elarisa100@mail.ru)

Редкоземельные манганиты смешанной валентности со структурой типа перовскита общей формулы  $A_{1-x}M_xMnO_3$  потенциально привлекательны для технологического применения в микроэлектронике, спинтронике, твердооксидных топливных элементах и датчиках. Фазовые изменения в манганитах и проявление их функциональных свойств определяются заменой трехвалентного редкоземельного элемента (А) на двухвалентный щелочноземельный элемент (М). Свойства манганитов зависят от среднего катионного радиуса в А-подрешетке, регулирующего искажение орторомбической структуры.  $GdMnO_3$  имеет орторомбическую структуру  $Pbnm$ , имеет параметры кристаллической решетки  $a=5.3087(1)$ ,  $b=5.8322(2)$ ,  $c=7.4275(1)\text{\AA}$ . Модификация барием родительского состава в количестве  $x=0.1$  не изменяет симметрию кристаллической решетки, но приводит к изменению параметров ячейки:  $a=5.3381(1)$ ,  $b=5.7913(1)$ ,  $c=7.4673(2)\text{\AA}$  и частичному снятию искажения орторомбической структуры, характеризующегося деформацией октаэдров  $MnO_6$ . Это объясняется проявлением стерического фактора, вследствие замещения ионов гадолиния ( $^{IX}rGd^{3+}=1,107\text{\AA}$ ) на более крупные ионы бария ( $^{IX}rBa^{2+}=1,47\text{\AA}$ ). Исходный  $GdMnO_3$  обладает только ян-теллеровскими ионами  $Mn^{3+}$ , что проявляется при нагреве переходом порядок – беспорядок (O'-O) при температуре  $T_{JT}=1000^\circ\text{C}$ . Замещение приводит к образованию ионов  $Mn^{4+}$  ( $^{VI}rMn^{4+}=0.53\text{\AA}$ ) вместо  $Mn^{3+}$  ( $^{VI}rMn^{3+}=0.65\text{\AA}$ ). Различие в величинах ионных радиусов гадолиния и бария оказывает влияние на формирование ян-теллеровского искажения в этих манганитах. Модификация барием исходного состава в приводит к понижению температуры ян-теллеровского перехода на  $60^\circ\text{C}$  ( $T_{JT}=940^\circ\text{C}$ ).

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИМЕТ УрО РАН на оборудовании ЦКП “Урал-М”.

# БЛИЖНИЙ МАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В ПАРАМАГНИТНОЙ ФАЗЕ КУБИЧЕСКОГО ПЕРОВСКИТА $\text{SrMnO}_{3-x}$ ( $x < 0.005$ ) ПО ДАННЫМ ЯМР $^{17}\text{O}$ и $^{87}\text{Sr}$

З.Н. Волкова, С.В. Верховский, А.П. Геращенко, К.Н. Михалев  
*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия  
E-mail: volkovazn@imp.uran.ru*

Магнитная восприимчивость слабо допированного электронами кубического перовскита  $\text{SrMnO}_{3-x}$  ( $x < 0.005$ ,  $T_N = 236$  К) в парамагнитной фазе демонстрирует щелевое поведение  $d\chi(T) \geq 0$  [1], что предполагает наличие ближнего магнитного порядка выше  $T_N$ . В настоящей работе выполнены измерения скоростей спин-решеточной  $T_1^{-1}$  и спин-спиновой  $T_2^{-1}$  релаксации ядер  $^{17}\text{O}$  и  $^{87}\text{Sr}$  в парамагнитной фазе манганита  $\text{SrMnO}_{3-x}$  с целью определить низкочастотные особенности спиновых корреляций соседних атомов Mn в области существования ближнего магнитного порядка ( $T_N < T < 420$  К).

Показано, что ниже 350 К изотропный вклад в скорость спин-спиновой релаксации ядер кислорода  $^{17}T_2^{-1} \sim n_{eg}$  (где  $n_{eg}$  – концентрация коллективизированных допированных электронов) демонстрирует немонотонное с максимумом поведение. Эта  $^{17}T_2^{-1}(T)$  аномалия свидетельствует о наличии низкочастотных ( $\nu \leq 10^3$  с $^{-1}$ ) флуктуаций ближнего магнитного порядка, обусловленных сменой AF  $\leftrightarrow$  FM спиновых конфигураций соседних магнитных ионов на связи Mn –  $^{17}\text{O}$  – Mn. В то же время подобная аномалия отсутствует в зависимости  $^{87}T_2^{-1}(T)$  на ядрах  $^{87}\text{Sr}$ , зонда локальных изменений спиновых конфигураций восьми соседних атомов Mn в ячейке перовскита. Анализ температурной зависимости изотропного вклада  $T_2^{-1}$  в скорость спин-спиновой релаксации ядер  $^{87}\text{Sr}$  в парамагнитной фазе  $\text{SrMnO}_{3-x}$  позволил исключить FM спиновые корреляции в пределах кубической элементарной ячейки и установить, что наиболее вероятными являются AF спиновые конфигурации трех типов: G ( $\mathbf{q} = \pi/a(1,1,1)$ ), C ( $\mathbf{q} = \pi/a(1,1,0)$ ) и A ( $\mathbf{q} = \pi/a(0,0,1)$ ). Причем именно наличие AF спиновых конфигураций с пониженной размерностью (A и C типы) проще всего объясняет щелевое поведение магнитной восприимчивости.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Функция» № АААА-А19-119012990095-0.

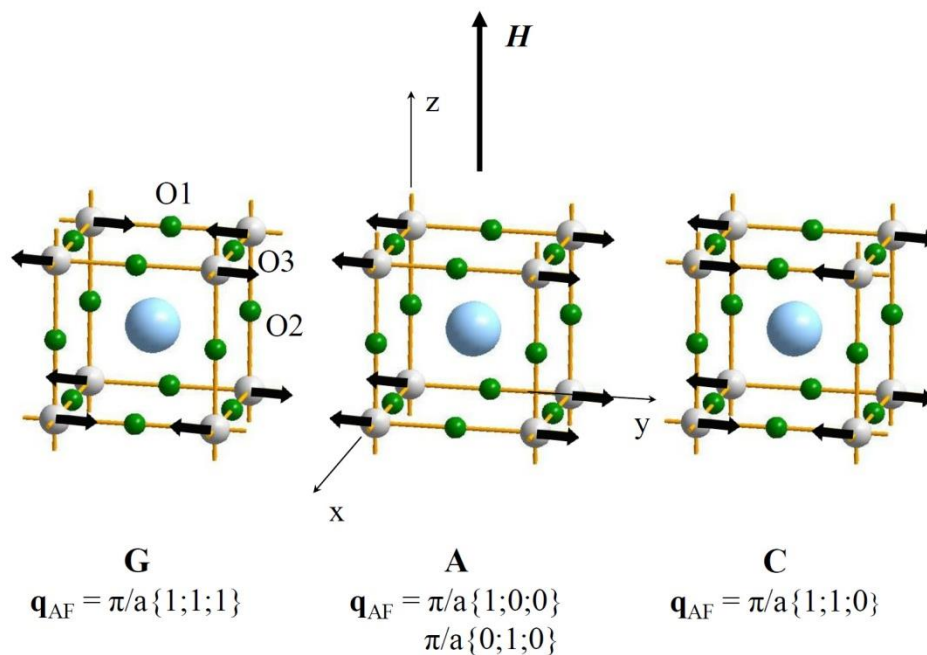


Рис. 1. AF спиновые конфигурации в парамагнитной фазе кубического SrMnO<sub>2.997</sub>.

## Литература

1. A. Trokiner et al., Phys. Rev. B **93**, 174413, 2016

## СПИНОДАЛЬНЫЙ РАСПАД ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ГЛИКОЛЕЙ ПРИ НАЛИЧИИ ЗАМКНУТОЙ ОБЛАСТИ НЕСОВМЕСТИМОСТИ

Волосников Д.В.<sup>1</sup>, Поволоцкий И.И.<sup>1</sup>, Васин М.Г.<sup>2,3</sup>, Скрипов П.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения РАН

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

<sup>3</sup>УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина  
*dima\_volosnikov@mail.ru*

Водные растворы гликолей, в частности, пропиленгликоли и полипропиленгликоли, относятся к веществам «зеленой химии» и находят свое применение в качестве безопасных теплоносителей и

компонентов при синтезе сложных химических элементов. Знание особенностей теплообмена в данных растворах при мощном импульсном воздействии позволит создавать эффективные схемы теплообмена, а, возможно, и миниатюрные системы охлаждения электронных устройств. Особенностью фазовых диаграмм (ФД, в координатах температура-концентрация) водных растворов полипропиленгликолей является наличие области несовместимости компонентов с резкой интенсификацией теплообмена. Снизу данная область определяется линией с НКТР (нижней критической температурой растворения), а сверху – линией с ВКТР (верхней критической температуры растворения). В наших исследованиях участвуют растворы с полным растворением (вода/пропиленгликоль), а также растворы вода/полипропиленгликоль с замкнутой областью несовместимости («close-loop» в англоязычной литературе).

Цель данной работы заключается в сравнении в сопоставимых условиях опыта интенсивности теплоотдачи в импульсно перегретых (относительно линии равновесия жидкость-пар) растворах относительно теплоотдачи, наблюдаемой как в области устойчивых состояний раствора (и их исходных компонентов), так и на фоне фазового перехода по механизму жидкость-жидкость и последующего спиноподобного распада (CP) [1].

В работе применен метод управляемого импульсного нагрева проволочного зонда в режиме изотермического воздействия [2], позволяющий исследовать вещества в устойчивых и перегретых состояниях. Давление в измерительной ячейке варьируется от атмосферного до давления, исключающего вскипание образцов ~ 33 МПа. Длительность нагрева веществ составляла от 10 до 100 мс.

В схеме автобалансного моста используется платиновый термометр сопротивления с известной градуировкой и реализуются кратковременные квазиизотермические условия при его импульсном нагреве в веществе  $T(t > t_1) = T_{st}(t) \approx const$ . Измеряются и рассчитываются значения температуры зонда  $T_{st}(t)$  и электрической мощности  $P(t; T_{st})$ , необходимой для её поддержания. Данная величина чувствительна к изменению интенсивности переноса тепла в серии опытов. Далее рассчитывается средняя (по поверхности зонда) плотность теплового потока и мгновенный коэффициент теплоотдачи  $K_T(t)$ , как основная переменная в опытах с мощным тепловыделением, при заданном температурном напоре  $\Delta T = T_{st} - T_0$ :

$$K_T(t) = [P(t) - P_{vac}(t)] / (\Delta T \cdot S_w), \quad (1)$$

где  $S_w$  – площадь поверхности зонда,  $P_{vac}$  – мощность тепловыделения в условиях вакуума.

Далее сопоставляются приведенные значения коэффициента теплоотдачи для выбранной концентрации раствора  $\Delta K_T(t)$  относительно соответствующего аддитивного значения  $K_{Tad}(t)$ :

$$\Delta K_T(t) = [K_T(t) - K_{Tad}(t)] / K_{Tad}(t) \quad (2)$$

где  $K_{Tad}(t) = \sum C_i \cdot K_{Ti}$ ,  $C_i$  и  $K_{Ti}$  – доля и значение коэффициента теплоотдачи  $i$  – го компонента раствора соответственно.

В докладе будет показано, что водные растворы пропиленгликолей в условиях отсутствия конвекции и фазовых переходов жидкость-пар переносят тепло хуже относительно аддитивных значений, вычисленных по уравнению (1), т.е.  $K_T(t) < K_{Tad}(t)$  [3]. В случае водных растворов полипропиленгликолей определены ФД и диапазоны температур и концентраций со значительной (относительно воды до трех раз) интенсификацией теплообмена,  $K_T(t) > K_{Tad}(t)$ . Сделан вывод о существенном влиянии области несовместимости компонентов на реализацию СР.

Работа выполнена при поддержке РФФ проект № 19-19-00115.

## Литература

1. В.П. Скрипов, А.В. Скрипов, Успехи физических наук, **128**, 6, **1979**
2. П.В. Скрипов, А.А. Старостин, Д.В. Волосников, Доклады РАН. **390**, 2, **2003**
3. Д.В. Волосников, И.И. Поволоцкий, А.А. Старостин, П.В. Скрипов, ТВТ. **59**, 3, **2021**
4. D.V. Volosnikov, I.I. Povolotskiy, A.A. Igolnikov, M.G. Vasin, L.D. Son, P.V. Skripov. J. Phys.: Conf. Ser., **1787**, 012032, **2021**



# МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ОБЪЕМНОГО МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

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

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*  
[bulatgnmail@gmail.com](mailto:bulatgnmail@gmail.com)

Изучение механизмов кристаллизации объемных металлических стекол (ОМС), обладающих выдающимися стеклообразующими способностями, становится более доступным с усовершенствованием устройств высокого давления [1]. Современные экспериментальные установки позволяют получать статические давления свыше 1000 ГПа в двухступенчатых устройствах высокого давления, где в качестве основного рабочего элемента выступают алмазные наковальни [2]. Внешнее давление является важным фактором для управления микроскопической структурой ОМС, что подтверждается как экспериментально, так и на основе результатов молекулярно-динамических расчетов [3,4].

Большинство ОМС состоят из трех или более химических элементов с сильно различающимися атомными радиусами, что приводит к образованию относительно устойчивой аморфной структуры. Среди бинарных ОМС выраженной стеклообразующей способностью обладает сплав  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ , который в нормальных условиях способен долгое время находиться в аморфном состоянии [5]. В настоящей работе мы показали, что этот сплав кристаллизуется при одновременном воздействии фиксированного сверхвысокого давления и сдвиговой деформации. Выявлено наличие порогового давления, необходимого для инициализации процесса формирования стабильной кристаллической фазы. Величина этого давления составляет  $\approx 400$  ГПа. Показано, что в результате сдвига происходит кристаллическое расслоение через сепарацию атомов Ni и Nb. Наблюдается образование двух высокоплотных кристаллических фаз, структура которых близка к гексагональной плотноупакованной. При этом установлено, что кристаллизация ОМС проходит две стадии. На первой стадии происходит «взрывная» кристаллизация системы и образование кристаллических доменов, состоящих из атомов Ni. Вторая стадия связана с образованием кристаллитов Nb, что, в итоге, приводит к полной кристаллизации системы. Наличие этих двух

стадий обусловлено существенной разницей в скорости роста кристаллических фаз Ni и Nb.

Полученные результаты показывают, что давление является ключевым фактором, с помощью которого можно управлять кристаллизацией ОМС. При этом полезные функциональные свойства металлических стекол, непосредственно связанные с наличием однородной аморфной структуры, могут быть потеряны при эксплуатации ОМС в условиях экстремальных нагрузок.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00022).

1. N. Dubrovinskaia и др., *Sci. Adv.*, **2**, e1600341, **2016**
2. V.V. Brazhkin, *Phys.-Usp.*, **63**, 523, **2020**
3. G. C. Sosso и др., *Chem. Rev.*, **116**, 7078, **2016**
4. B. N. Galimzyanov, A.V. Mokshin, *Int. J. Solids Structures*, **224**, 111047, **2021**
5. S. Lesz, G. Dercz, *J. Therm. Anal. Calorim.*, **126**, 19, **2016**

## ДЕГРАДАЦИЯ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СПЛАВЕ Fe<sub>50</sub>Rh<sub>50</sub> ПРИ ДОЛГОВРЕМЕННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ ДО 8 Тл

А.Г. Гамзатов<sup>1</sup>, А.М. Алиев<sup>1</sup>, А.Б. Гаджиев<sup>1</sup>, К. Qiao<sup>2</sup>, F. Hu<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>*Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China  
e-mail: gamzatov\_adler@mail.ru*

Известно, что к материалам для использования в технологии магнитного охлаждения предъявляется большое количество требований, среди которых основным является то, что материал должен обладать большой величиной магнитокалорического эффекта (МКЭ) в области комнатных температур [1–3]. На самом деле это требование должно быть дополнено требованием стабильности

магнитокалорических свойств в условиях длительного воздействия циклических магнитных полей, так как именно в таких условиях будет функционировать рабочее тело твердотельного магнитного холодильника. Можно предположить, что материалы с магнитными фазовыми переходами второго рода будут обладать стабильными магнитокалорическими свойствами ввиду отсутствия сильных изменений решетки и гистерезисных явлений в области фазовых переходов. Но большая часть известных в настоящее время перспективных магнитокалорических материалов - это материалы с магнитоструктурными фазовыми переходами первого рода. Ярким представителем таких материалов являются сплавы Fe-Rh [4].

В данной работе приводятся результаты исследования частотной зависимости МКЭ в полях 0.62 и 1.2 Тл и деградации магнитокалорических свойств для сплава Fe<sub>50</sub>Rh<sub>50</sub> в магнитных полях до 8 Тл.

На Рис.1 приведены результаты исследования МКЭ при разных частотах при H=1.2 Тл. Как видно из рис.1а с ростом частоты магнитного поля наблюдается смещение максимума в сторону низких температур, при этом величина эффекта уменьшается незначительно. Вследствие этого явления мы наблюдаем (рис.1б), что ниже температуры максимума в узком интервале температур 369.2-370.2 К наблюдается аномальный рост величины МКЭ с ростом частоты магнитного поля (до 11 Гц).

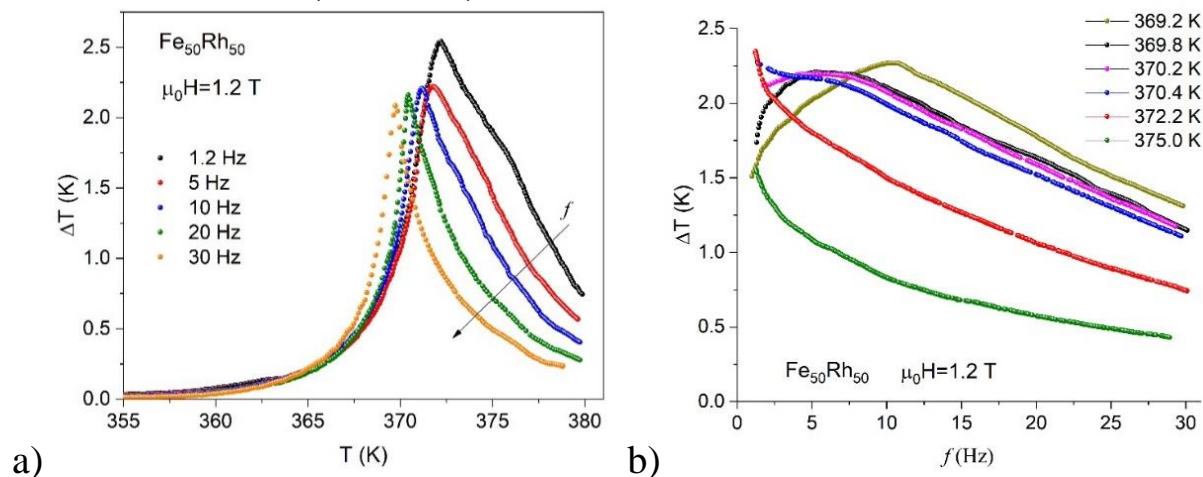


Рис.1. а) Температурная зависимость МКЭ при разных частотах, б) частотная зависимость МКЭ при разных T в поле 1.2 Тл.

Помимо частотных измерений было исследовано деградация МКЭ при длительном воздействии циклических полей 1.8 и 8 Тл. Обнаружено, что величина МКЭ слабо деградируется со временем. Т.е. с увеличением количества циклов магнитного поля величина

МКЭ сначала уменьшается, а затем постепенно стабилизируется. Ухудшение максимальной величины МКЭ в основном вызвано движением доменных границ FM и AFM во время циклов магнитного поля. Максимальные значения МКЭ в магнитных полях 0-8 Тл и 0-1.8 Тл составляют 13 К и 4.8 К соответственно. После стабилизации МКЭ уменьшается на 0.5 К или примерно на 4% при изменении поля 0-8 Тл, а для изменения поля 0-1.8 Тл на величину 0.7 К, что составляет примерно 14%, эти изменения намного меньше, чем ранее обнаруженных [5-6].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Государственного фонда естественных наук Китая в рамках научного проекта № 21-58-53046.

#### Литература

1. К.А. Gschneidner, Jr., V.K. Pecharsky. Int. J. Refrigeration **31**, 945, **2008**
2. М.Н. Phan, S.C. Yu. J. Magn. Magn. Mater. **308**, 325, **2007**
3. В.Ф. Yu, Q. Gao, et al, Int. J. Refrigeration **26**, 622, **2003**
4. S.A. Nikitin, G. Myalikgulyev, et al, Phys. Lett. A **148**, 363, **1990**
5. А. М. Aliev, А. В. Batdalov, et al, APL **109**, 202407, **2016**
6. А. М. Aliev, L. N. Khanov, А. G. Gamzatov, et al, **118**, 072404, **2021**

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕХОДА МЕЖДУ АМОРФНЫМИ ФАЗАМИ ЛЬДА И РАСЧЕТ ИХ УПРУГИХ СВОЙСТВ

А. А. Гаркуль<sup>1,2</sup>, В. В. Стегайлов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт

(национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединённый институт высоких температур РАН

*garkul.aa@phystech.edu*

В отличие от обычных фазовых переходов первого рода, кинетика переходов кристалл-аморфная форма и аморфная-аморфная

форма изучена гораздо меньше. Предполагается, что нестабильность решетки является механизмом, который запускает твердотельную аморфизацию. Мягкие моды совместных колебаний могут отвечать за изменение координации в аморфных фазах льда.

Для микроскопического понимания того, как проходят подобные превращения в кристаллических и аморфных льдах, эффективным теоретическим инструментом является метод молекулярной динамики (МД).

В данной работе рассматривается модель льда TIP4P/Ice. Получен аморфный лед высокой (HDA) и низкой (LDA) плотности и проведен анализ структуры на основе радиальной функции распределения. Также, поскольку свойства аморфных веществ могут зависеть от процесса их приготовления, изучается влияние скоростей сжатия и охлаждения. Рассмотрены превращения между аморфными формами льда при изотермическом сжатии/декомпрессии и изобарическом нагреве. Проведен расчет упругих модулей аморфного льда, получены барическая и температурная зависимости упругих модулей, результат сопоставляется с экспериментом.

## Литература

1. E. Gromnitskaya, O. Stal'gorova, V. Brazhkin, and A. Lyapin, "Ultrasonic study of the nonequilibrium pressure-temperature diagram of h<sub>2</sub>o ice," *Physical Review B*, vol. 64, no. 9, p. 094205, **2001**
2. C. A. Tulk, J. J. Molaison, A. R. Makhluf, C. E. Manning, and D. D. Klug, "Absence of amorphous forms when ice is compressed at low temperature," *Nature*, vol. 569, no. 7757, pp. 542–545, **2019**
3. J. Abascal, E. Sanz, R. Garcia Fernandez, and C. Vega, "A potential model for the study of ices and amorphous water: Tip4p/ice," *The Journal of chemical physics*, vol. 122, no. 23, p. 234511, **2005**

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ ГРАНУЛИРОВАННОЙ КЕРАМИКИ $\text{La}_{0.8}\text{Ag}_{0.1}\text{MnO}_3$ ПРИ ПРИЛОЖЕНИИ ДАВЛЕНИЯ ДО 8,5 ГПа

С.А.Гудин<sup>1\*</sup>, А.Г.Гамзатов<sup>2</sup>, Т.Р.Арсланов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия*

<sup>2</sup> *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*

*\* e-mail: [gudin@imp.uran.ru](mailto:gudin@imp.uran.ru)*

Выявление механизмов рассеяния [1] – [5], приводящих к появлению колоссального магнитосопротивления (МС) в допированных манганитах, является актуальной задачей физики конденсированного состояния. Большинство имеющихся в литературе сведений о влиянии внешнего гидростатического давления на магнитотранспортные свойства манганитов ограничено давлениями порядка 2 ГПа. В данной работе представлены результаты влияния гидростатического давления до 8.5 ГПа на транспортные свойства керамического гранулированного манганита  $\text{La}_{0.8}\text{Ag}_{0.1}\text{MnO}_3$  вблизи температуры максимума магнитосопротивления (температуры фазового перехода в ферромагнитное состояние). На барической зависимости сопротивления обнаружены аномалии (рис.1) в виде излома хода сопротивления при  $P=3.85$  ГПа. Показано, что обнаруженный переход с одного линейного изменения температурного хода удельного сопротивления на другой (построенного в логарифмическом масштабе) однозначно связан с существованием в керамическом образце двух процессов рассеяния, - внутризернового и приграничного. Вблизи точки перехода оба процесса рассеяния вносят сравнимые по величине вклады в удельное сопротивление. Для давлений меньше 3,85 ГПа преобладает вклад в сопротивление от механизмов рассеяния в приграничных слоях зерен, а для высоких давлений преобладает вклад от области однородного зерна. Приведено объяснение обнаруженному нами гистерезисному поведению сопротивления в режиме нагружения и снятия нагрузки.

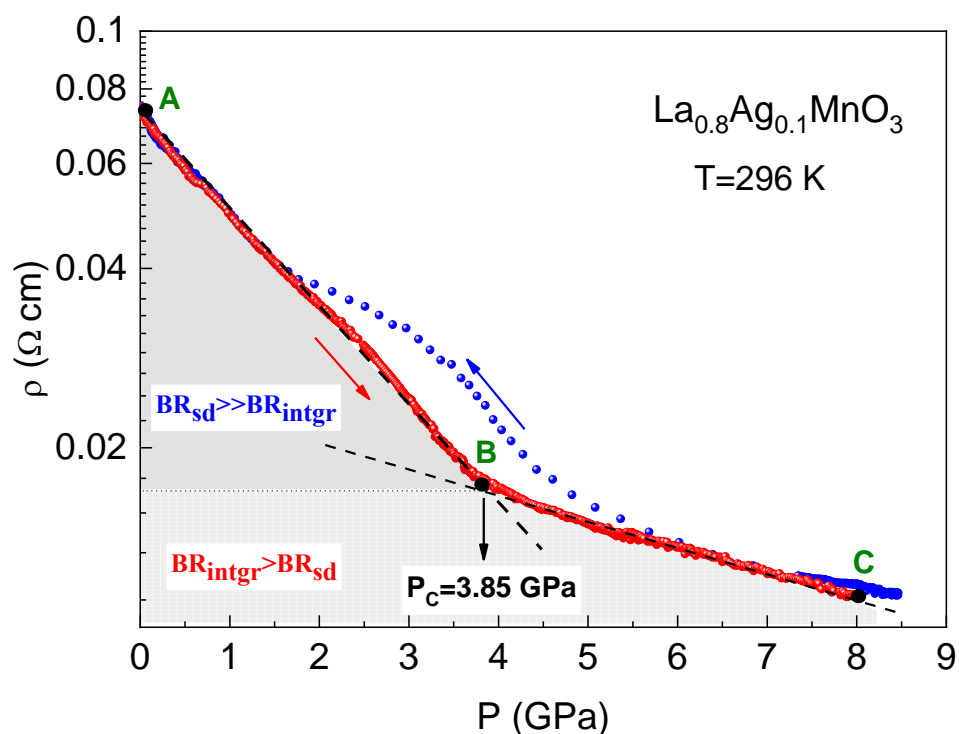


Рис.1.

Зависимость удельного электросопротивления  $\rho$  от приложенного гидростатического давления при  $T=296 \text{ K}$  в процессе нагружения (красная кривая) и снятия нагрузки (синие точки).

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ «Квант» No. АААА-А18-118020190095-4 при частичной поддержке РФФИ (проект № [19-02-01000](#)).

#### Литература

1. С.А.Гудин, М.И.Куркин, и др., ЖЭТФ, **148** (5), 1005, **2015**
2. С.А.Гудин, Н.И.Солин, и др., ФТТ, **60** (6), 1067, **2018**
3. А.Г.Гамзатов, Т.А.Гаджимурадов, и др. ЖЭТФ, **149** (1), 172, **2016**
4. С.А.Гудин, Н.И.Солин ЖЭТФ, **157** (4), 648, **2020**
5. С.А.Гудин, Н.И.Солин ФТТ, **62** (5), 669, **2020**

# СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ РАШБЫ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ НА ОСНОВЕ ТЕЛЛУРИДА РТУТИ С ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ ВБЛИЗИ ТОЧКИ ИНВЕРСИИ ЗОН

Гудина С.В.<sup>1</sup>, Неверов В.Н.<sup>1</sup>, Попов М.Р.<sup>1</sup>, Шелушина Н. Г.<sup>1</sup>,  
Якунин М.В.<sup>1</sup>, Дворецкий С. А.<sup>2</sup>, Михайлов Н. Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН*  
*e-mail: svrova@imp.uran.ru*

<sup>2</sup> *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН*

В гетероструктурах на основе HgTe и CdTe скомбинированы широкозонный (CdTe) и бесщелевой (HgTe) полупроводники, основные зоны в которых образуются состояниями симметрии  $\Gamma_8$  и  $\Gamma_6$ . При изменении ширины,  $d$ , одиночные квантовые ямы (КЯ) HgTe между барьерами, образованными CdTe (или HgCdTe с большой запрещенной щелью), могут быть реализованы в двух существенно различных вариантах энергетической структуры: с нормальным (тривиальным) и инвертированным порядком зон, когда край зоны проводимости формируется  $p$ -состояниями зоны  $\Gamma_8$ , а не  $s$ -состояниями зоны  $\Gamma_6$ , как в традиционных гетеросистемах [1]. Кроме того, инверсия зон происходит при изменении содержания кадмия в катионной подрешетке, так что в двумерной системе на основе HgCdTe инверсия будет иметь место при другом значении критической ширины  $d = d_c$  квантовой ямы, чем в случае КЯ из чистого HgTe, где  $d_c = 6.3$  нм.

Важными факторами, способствующими большой величине спин-орбитального расщепления Рашбы [2] в квантовых ямах II-VI HgTe, являются малая величина энергетической щели и инвертированный тип зонной структуры. Типичные значения энергии расщепления Рашбы, составляют от 17 мэВ [3] до 30 мэВ [4, 5], что заметно больше, чем для узкощелевых систем III-V (3-5 мэВ) [6].

Для определения параметров спин-орбитального расщепления Рашбы в КЯ наиболее распространено исследование области квантующих магнитных полей для обнаружения и анализа биений осцилляций Шубникова-де Гааза (ШдГ). Слагаемое, ответственное за спин-орбитальное расщепление Рашбы в законе дисперсии двумерной подзоны, в низшем порядке по  $k_{||}$  ( $k_x, k_y, 0$ ) для зон  $s$ - (зона  $\Gamma_6$ ) и  $p$ - типа (зона  $\Gamma_8$ ) получено в виде [7]:

$$\varepsilon_{\Gamma_6}^{SO} = \pm \langle \alpha E_z \rangle k_{||} \text{ и } \varepsilon_{\Gamma_8}^{SO} = \pm \langle \beta E_z \rangle k_{||}^3, \quad (1)$$



где  $\alpha$  и  $\beta$  - коэффициенты спин-орбитальной связи,  $E_z$  - эффективное электрическое поле в направлении  $z$ . Исходя из разницы концентраций носителей,  $\Delta n$ , в спиновых подзонах, найденной из Фурье-спектров осцилляций ШдГ, имеется возможность экспериментального определения префакторов  $\langle \alpha E_z \rangle$  и  $\langle \beta E_z \rangle$  в формулах (1).

Исследована серия образцов  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$  с шириной квантовой ямы 7 – 15 нм, симметрично ( $x=0$ ; 0.11;  $y=0.78$ ; 0.64) и асимметрично ( $x=0.15$ ; 0.05;  $y=0.85$ ; 0.53) легированных в барьере, с концентрацией носителей заряда  $n \approx 1.3 - 4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ . Самосогласованный расчет в приближении Хартри [8] показал, что один из асимметрично легированных образцов (15 нм) обладал инвертированной зонной структурой, тогда как другой (13 нм) – нормальным порядком зон, но в последнем электронная подзона все же содержит заметную долю волновых функций  $p$ -типа. Из Фурье-анализа осцилляций магнитосопротивления было найдено, что параметры  $\langle \alpha E_z \rangle = 3.7 \times 10^{-6} \text{ мЭВ} \cdot \text{см}$  (13 нм) и  $\langle \beta E_z \rangle = 5.0 \times 10^{-19} \text{ мЭВ} \cdot \text{см}^3$  (15 нм), в асимметричных структурах, и  $\langle \alpha E_z \rangle = 0.5 \times 10^{-7} \text{ мЭВ} \cdot \text{см}$  - в симметричных. По значению параметра спин-орбитального взаимодействия, а также из магнитолевой зависимости величины полного спинового расщепления, полученной из анализа положения узлов биений осцилляций ШдГ, определены значения спин-орбитального расщепления на уровне Ферми, которые достигают 27 мЭВ для асимметрично легированных ям и 5 мЭВ – для симметрично легированных, а также получены оценки значения  $g$  фактора  $|g| \geq 40$ . Значение спин орбитального расщепления Рашбы столь велико благодаря сочетанию сильной структурной асимметрии квантовых ям, высокой концентрации электронов и большой доли состояний  $p$ -типа в нижней подзоне зоны проводимости.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, грант 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

## Литература

1. M. Konig, et al., Science **318**, 766, **2007**
2. Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C **17**, 6039, **1984**
3. X. C. Zhang, et al., Phys. Rev. B **63**, 245305, **2001**
4. Y. S. Gui, et al., Phys. Rev. B **70**, 115328, **2004**

5. К. Э. Спирин, и др., Письма в ЖЭТФ **92**, 65, **2010**
6. W.Z. Zhou, et al., Solid State Communications **143**, 300, **2007**
7. R. Winkler, Phys. Rev. B **62**, 4245, **2000**
8. Л.С. Бовкун, и др., ФТП **52**, 1274, **2018**

## КВАНТОВЫЙ ТРАНСПОРТ ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ СИСТЕМЫ АТОМНОГО МАСШТАБА

Ключанцев А.Б., Дзедзисашвили Д.М.

*Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036  
Красноярск, Россия, akeyev@gmail.com, ddm@iph.krasn.ru*

В работе предложена теория туннельного квантового транспорта электронов через системы атомного масштаба (далее устройства). В основе теории лежит диаграммная техника для неравновесных функций Грина, построенных на операторах Хаббарда (НДТХ). Введение операторов Хаббарда, описывающих состояния устройства, позволяет представить гамильтониан устройства в диагональном виде, а связь с двумя контактами учитывать по теории возмущения.

Отличие нашего подхода от предложенных ранее теорий квантового транспорта на основе НДТХ [1,2,3], заключается в алгоритме вычисления среднего от произведения произвольного числа диагональных операторов Хаббарда:  $\langle X^{nn} X^{ll} X^{mm} \dots \rangle$ . В работах [1,2,3] для этой цели использовалось куммулянтное разложение [4], которое было разработано для решеточных (многоячеечных) моделей. В задаче о туннельном транспорте через рассматриваемое “одноячеечное” устройство куммулянтное разложение не просто избыточно, но и при неизбежном использовании приближений приводит к появлению фиктивных (т.е. в действительности не существующих) вкладов. В нашей же теории при вычислении указанного среднего явным образом используется тот факт, что все диагональные операторы определены на одном узле. Например, при усреднении по нулевому гамильтониану имеем:

$$\langle X^{nn} X^{ll} X^{mm} \dots \rangle_0 = \delta_{nl} \delta_{lm} \dots \langle X^{nn} \rangle_0.$$

В работе показано, что учет отмеченного обстоятельства приводит к важным изменениям правил НДТХ. В частности, оказывается, что любая диаграмма произвольного порядка может содержать только одно среднее от произведения диагональных  $X$ -

операторов, и это среднее входит только в силовой оператор  $P_{\alpha\beta}^{ab}$  (где  $\alpha, \beta$ -корневые вектора, а  $a, b = \pm$ ). Массовый оператор  $\Sigma_{\alpha\beta}^{ab}$  не содержит указанных средних, и как следствие не содержит безпетлевых диаграмм. Простейшие вклады в  $\Sigma_{\alpha\beta}^{ab}$  являются однопетлевыми. Кроме того, если при распутывании T-упорядоченных средних от X-операторов по теореме Вика использовать наряду с принципом топологической непрерывности [4] также старшинство фермиевских X-операторов над бозевскими, то указанные однопетлевые вклады для  $\Sigma_{\alpha\beta}^{ab}$  не зависят от частоты и диагональны по индексам  $a, b = \pm$ .

Учитывая перечисленные особенности НДТХ и то, что в выражение для тока входят только недиагональные функции Грина  $D_{\alpha\beta}^{\pm\mp}$  [5], в однопетлевом приближении для  $\Sigma_{\alpha\beta}^{ab}$  и цепочечном приближении для  $P_{\alpha\beta}^{ab}$  удастся получить выражение для туннельного тока в достаточно общем (т.е. подходящем для любого устройства) виде:

$$I = \sum_{\sigma} e \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \Gamma_{L\sigma}(\omega) \Gamma_{R\sigma}(\omega) \cdot [n(\hbar\omega - V) - n(\hbar\omega)] \cdot W_{\sigma}(\omega),$$

где функции  $\Gamma_{L(R)\sigma}(\omega)$  описывают связь устройства с левым и правым контактами,  $V$ - приложенное к правому контакту напряжение,  $n(\hbar\omega)$  – функция распределения Ферми-Дирака, а  $W_{\sigma}(\omega)$  – некоторая сложная спектральная функция, содержащая всю информацию об устройстве.

В качестве простейшего примера применения развитой в работе теории проводится расчет вольтамперных характеристик и дифференциальной проводимости устройства, состоящего из одной Андерсоновской орбитали в магнитном поле с величиной кулоновского отталкивания двух электронов  $U = \infty$ . Рассчитанные зависимости туннельного тока и дифференциальной проводимости от  $V$  сравниваются с полученными ранее в работе [6] результатами.

## Литература

1. В.В. Вальков, С.В. Аксенов, Е.А. Уланов, Письма в ЖЭТФ, **98**, 459 **2013**
2. I. Sandalov, B. Johansson, O. Eriksson, International Journal of Quantum Chemistry, **94**, 113 **2003**

3. F. Chen, M.A. Ochoa, M. Galperin, J. Chem. Phys. **146**, 092301 **2017**
4. S.G. Ovchinnikov, V.V. Val'kov, Hubbard Operators in the Theory of Strongly Correlated Electrons (Imperial College Press, 2004).
5. В.В. Вальков, С.В. Аксенов, ТМФ, **194**, 277 **2018**
6. N. Sivan N.S. Wingreen, PRB, **54**, 11622 **1996**

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОДВИЖНОСТИ НА БИНОДАЛИ ЖИДКОСТЬ-ГАЗ ДЛЯ СИСТЕМ С РАЗЛИЧНЫМ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕМ ПРИТЯЖЕНИЯ

Дмитрюк Н.А., Мистрюкова Л.А., Крючков Н.П., Юрченко С.О.  
МГТУ им. Н.Э. Баумана  
[st.yurchenko@mail.ru](mailto:st.yurchenko@mail.ru)

Диффузия играет ключевую роль в широком классе процессов и явлений важных с точки зрения живой природы и технических систем, например обменные процессы в живых клетках или кинетика химических реакций. Несмотря на долгую историю исследований и существование различных теоретических моделей диффузии, связь диффузии и спектров элементарных возбуждений в жидкостях все еще слабо изучена.

В рамках настоящей работы была проведена серия расчетов методом молекулярной динамики, направлена на выявление связи между спектрами элементарных возбуждений и подвижностью частиц в простых жидкостях. Были рассмотрены системы частиц, взаимодействующие по обобщенному потенциалом Леннарда-Джонса

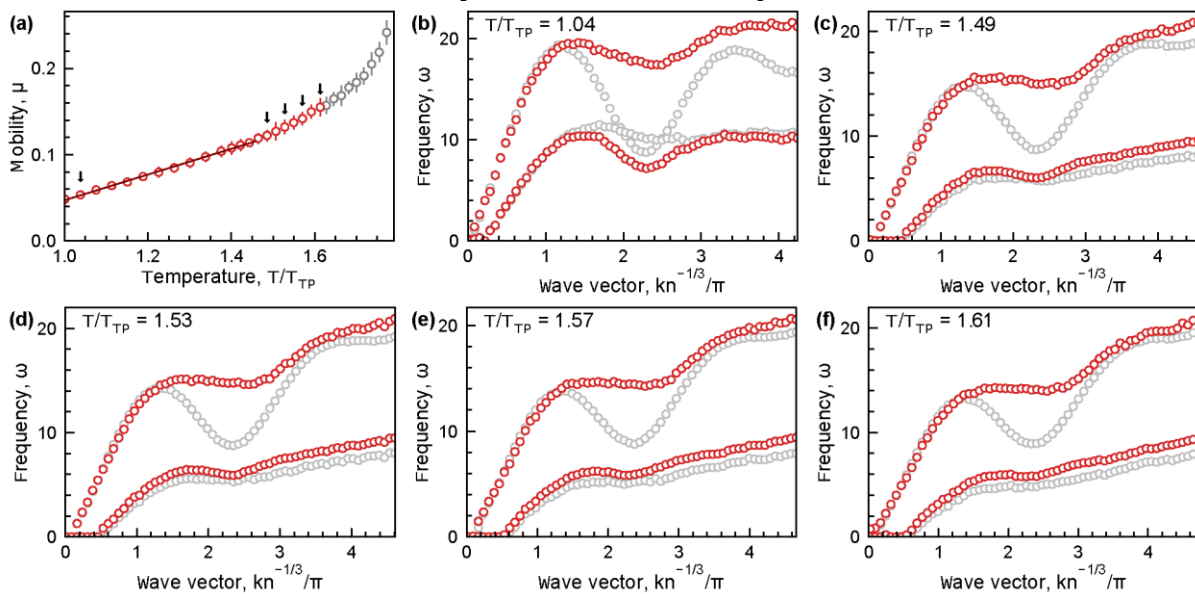
$$U_{n-m}(r) = 4\varepsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^m \right] \quad \begin{matrix} \text{(LJn-m)} \\ \text{с} \\ \text{различными} \\ \text{степенями} \end{matrix}$$

притяжения:

где  $\varepsilon$  и  $\sigma$  - магнитуа и характерный масштаб отталкивания соответственно. Рассмотрены потенциалы LJ12-4, LJ12-5, LJ12-6, LJ16-6 и, для сравнения с реальными веществами, этан [1]. Моделирования выполнялись в NVT ансамбле для систем состоящих из  $10^4$  частиц с помощью программного пакета LAMMPS [2]. Для рассматриваемых систем рассчитаны фазовые диаграммы в области жидкость-газ путем моделирования сосуществования двух фаз [3]. На полученных конденсированных бинодалях были рассчитаны значения

диффузии и спектры элементарных возбуждений с использованием совместного анализа мод [4].

На Рис.1 представлен пример полученных результатов для потенциала Леннарда-Джонса (LJ12-6). На панели (a) представлена температурная зависимость подвижности для состояний, соответствующих конденсированной бинодали. На панелях (b-f) показаны спектры элементарных возбуждений, рассчитанных в точках, отмеченных черными стрелками на Рис. 1(a). Можно обратить внимание, что зависимость подвижности от температуры на линии бинодали имеет два участка: вблизи тройной точки



(a) Температурная зависимость подвижности частиц рассчитанная на бинодали жидкость-газ в системе с потенциалом LJ12-6.

(b) - (f) Спектры в системе с потенциалом LJ12-6. Красным цветом показана зависимость спектров, рассчитанная совместным анализом мод, серым цветом – раздельным [4].

зависимость близка к линейно, но начинает отклоняться от нее при приближении к критической точке. Момент изменения тренда зависимости подвижности от температуры коррелирует с качественным изменением вида спектров элементарных возбуждений: дисперсионная зависимость продольных возбуждений изменяется от немонотонного вида к монотонному. Аналогичная ситуация наблюдается и в остальных рассмотренных системах.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда  
Проект № 20-12-00356.

## Литература

1. J. R. Mick et al., J. Chem. & Engin. Data 62, 1806, **2017**
2. S. Plimpton, J. Comput. Phys. 117, 1, **1995**
3. F. Biscay, A. Ghoufi, V. Lachet, and P. Malfreyt, J. Phys. Chem. C, 8670, **2011**
4. N.P. Kryuchkov et al., Scientific Reports, **9**, 1, 1-12, **2019**

## ТЕРМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ РАСТВОРОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА В СИЛИКАТНЫХ СТЕКЛАХ

Ефимченко В.С., Мелетов К.П., Короткова М.А.  
*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН*  
*efimchen@issp.ac.ru*

Существует большой интерес к поиску новых материалов – контейнеров водорода, необходимых для нужд водородной энергетики. Помимо высокого содержания водорода, данные материалы должны высвобождать его при давлениях и температурах, близких к нормальным. Твердые растворы и соединения, в которых водород находится в молекулярной форме и связан с решеткой «хозяина» слабыми Ван-дер-ваальсовыми связями, неустойчивы при нормальных условиях и выделяют водород значительно ниже комнатной температуры.

Нами проведены исследования термической устойчивости концентрированных твердых растворов молекулярного водорода  $\text{SiO}_2\text{-}0.7\text{H}_2$  и  $\text{Li}_2\text{O}\bullet 6\text{SiO}_2\text{-}0.25\text{H}_2$ , синтезированных при давлении 7.5 ГПа и температуре 290 °С. В растворе  $\text{SiO}_2\text{-}0.7\text{H}_2$  в спектре комбинационного рассеяния света (КРС) были определены позиции линий водорода и кварцевого стекла [1]. Термическая устойчивость

раствора  $\text{SiO}_2\text{-}0.7\text{H}_2$  при нормальном давлении была также изучена методом комбинационного рассеяния света в интервале температур от  $-130\text{ }^\circ\text{C}$  до  $-80\text{ }^\circ\text{C}$ . Предполагая, что относительная интенсивность ротационной линии водорода при  $328\text{ см}^{-1}$  пропорциональна количеству растворившегося водорода, были построены зависимости состава раствора от времени для различных температур отжига. Полученные постоянные времени  $\tau$  распада раствора от обратной температуры  $1/T$  показаны на рисунке 1. Используя эту зависимость, было установлено, что концентрированный раствор водорода в кварцевом стекле при комнатной температуре должен распадаться за 1.5 минуты. Энергия активации распада  $E_a=0.16\text{ эВ}$  раствора  $\text{SiO}_2\text{-}0.7\text{H}_2$  находится в интервале энергий характерных для Ван-дер-ваальсеваго взаимодействия.

Согласно данным КРС, гидрированное гексасиликатное литиевое стекло  $\text{Li}_2\text{O}\cdot 6\text{SiO}_2$  содержало водород в молекулярной форме. Термическая устойчивость и общее содержание водорода в данном растворе были определены методом термодесорбции в заранее известном объеме. Наличие катионов лития, на позициях ранее доступных водороду, возможно привело к уменьшению общего содержания  $\text{H}_2$  до  $X=0.25$  в гидрированном стекле  $\text{Li}_2\text{O}\cdot 6\text{SiO}_2$  по сравнению с раствором водорода в кварцевом стекле. Однако, количество водорода в гидрированном гексасиликатном литиевом стекле при комнатной температуре в течении 225 минут уменьшалось лишь до  $X=0.20$ . Столь высокая устойчивость раствора  $\text{Li}_2\text{O}\cdot 6\text{SiO}_2\text{-}0.25\text{H}_2$  при комнатной температуре, по сравнению с раствором  $\text{SiO}_2\text{-}0.7\text{H}_2$ , может указывать на более сильное взаимодействие молекул водорода с окружающей решеткой или на изменение условий диффузии молекул  $\text{H}_2$ .

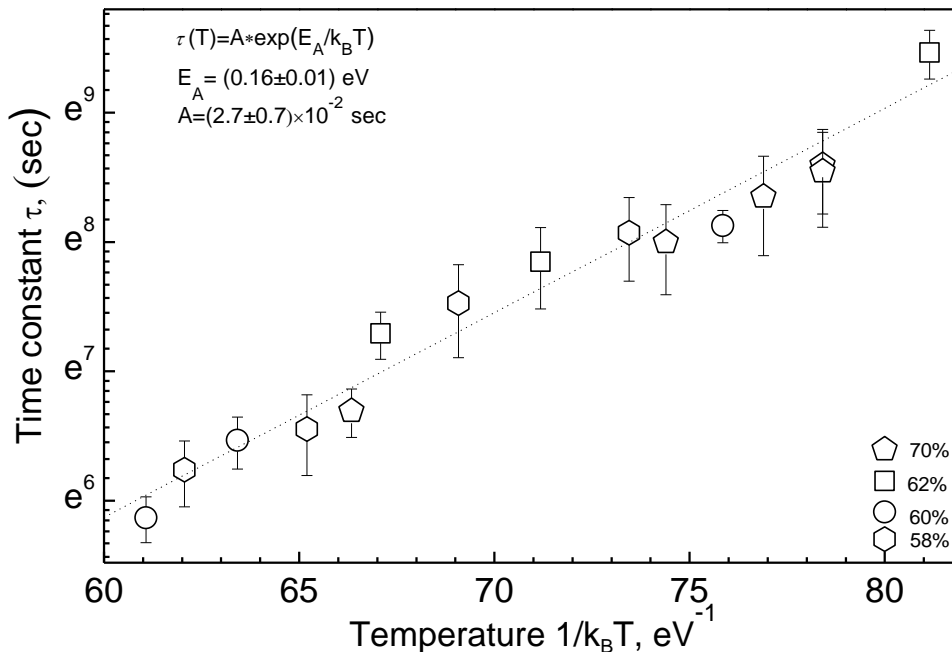


Рисунок 1. График Аррениуса для постоянной времени  $\tau$  образцов гидрированного кварцевого стекла, отожженных при различных температурах  $T$  (светлые символы), и его линейная аппроксимация (пунктирная линия). Различные символы используются для обозначения содержания водорода в образцах (58, 60, 62 или 70%) перед отжигом.  $k_B$  - постоянная Больцмана.

## Литература

1. К.Р. Meletov, V.S. Efimchenko, International Journal of Hydrogen Energy, in press, **2021** DOI:10.1016/j.ijhydene.2021.04.144

## БОРИРОВАННЫЙ АЛМАЗ: НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ.

Зибров И.П., Филоненко В.П., Краснорусский В.Н.  
 Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН  
[zibrov@hppi.troitsk.ru](mailto:zibrov@hppi.troitsk.ru)

Интерес к борированным алмазам значительно вырос после обнаружения в них сверхпроводимости [1]. Во многих работах



изучались свойства таких алмазов, и было показано, что максимальная растворимость бора составляет 3-4%. Нами было приготовлено несколько десятков образцов борированных алмазных порошков из различных исходных компонентов: коксовый пек, газовая сажа, глобулярный графит, аморфный бор, М-карборан, адамантан и т.д.. Из всего многообразия результатов было выявлено главное: параметры элементарной ячейки алмаза с бором имеют два дискретных значения:  $\sim 3.570 \text{ \AA}$  для концентрации В  $\sim 1\%$  и  $\sim 3.578 \text{ \AA}$  для концентрации В  $\sim 2\%$  (Рис.1а) Полнопрофильный анализ дифрактограмм образцов показал (Рис.1б), что в материале с бором присутствуют вакансии (это следует из данных по занятости позиции (8а) в алмазной ячейке углеродом и бором, которая в сумме менее 1.0), концентрация которых втрое превышает концентрацию бора в алмазах. Предполагается, что вакансии могут образовывать устойчивые комплексы с бором [2].

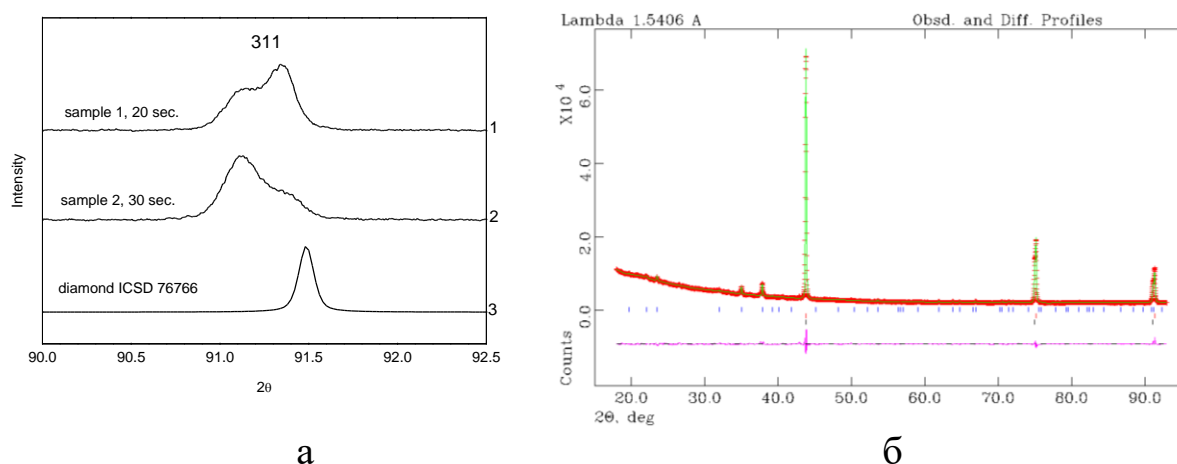


Рис.1. а- дифракционная картина в области алмазного пика (311): 1- образец №1, 2-образец №2, 3-алмаз (ICSD 76766). б- полнопрофильный анализ образца №1. Экспериментальные (+), рассчитанные (сплошная линия) и разница между экспериментальными и рассчитанными данными (нижняя кривая) рентгеновской дифракции. Положения всех разрешенных брэгговских рефлексов показаны в виде рядов вертикальных маркеров: верхний ряд - В<sub>4</sub>С, нижние ряды – алмазы.

Таблица.

№ п/п	Исходные компоненты	Количество бора в смеси, ат.%	Параметры синтеза	
			P, ГПа	T, °C
1	Нанюуглерод, М-карборан	12.5	7.5-8.0	≈ 1700
2	Нанюуглерод, М-карборан	12.5	7.5-8.0	≈ 1700
3	Пек, аморфный бор	10.0	7.5-8.0	≈ 1700
4	Сажа, пек, аморфный бор	6.5	7.0-7.5	≈ 1600
5	Сажа, адамантан, аморфный бор	4.5	7.5-8.0	≈ 1800

Было проведено наблюдение вытеснения магнитного поля из трех образцов №3, №4 и №5 (наблюдение эффекта Мейснера) с помощью измерения намагниченности на вибрационном магнитометре установки PPMS-9 производства Quantum Design. Измерения проводились в режиме охлаждения в нулевом магнитном поле ( $H$ ), так называемом режиме ZFC –FC при 20 Э и 100 Э. По температуре начала диамагнитного вклада в намагниченность была определена температура сверхпроводящего перехода ( $T_c$ ). Для образцов №3 и №5, для которых параметр  $a \approx 3.576 \text{ \AA}$ ,  $T_c$  составляет 4.0 К и 4.4 К, а для №4, для которого параметр  $a \approx 3.570 \text{ \AA}$   $T_c = 10.2 \text{ К}$ . Таким образом, можно предположить, что двум разным комплексам бор-вакансия в алмазе соответствуют две разные температуры перехода в сверхпроводящее состояние – 4 К и 10 К.

#### Литература

1. Ekimov E.A, Sidorov V.A, Bauer E.D, Mel'nik N.N, Curro N.J, Thompson J.D, Stishov S.M., Nature, **542**, 428(6982), **2004**
2. Zibrov, I.P., Filonenko, V.P., Crystals, **8**, 297-301, **2018**

## ВЯЗКОСТЬ РАСПЛАВОВ AL-CU-CO

Камаева Л. В.<sup>1,2</sup>, Рыльцев Р. Е.<sup>3,2</sup>, Щелкачев Н. М.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>УдмФИЦ УрО РАН

<sup>2</sup>ИФВД РАН

<sup>3</sup> ИМет УрО РАН

*lara\_kam@mail.ru*

В работе исследованы температурные и концентрационные зависимости вязкости расплавов Al-Cu-Co. В системе Al-Cu-Co существует стабильная квазикристаллическая фаза – d-AlCuCo с декагональной структурой, поэтому вязкость изучали в концентрационной области образования этой фазы.

Температурные зависимости коэффициента кинематической вязкости ( $\nu$ ) расплавов Al-Cu-Co в интервале от ликвидус до 1600°C не имеют значимых особенностей, хорошо описываются уравнением Аррениуса, что свидетельствует об отсутствии каких-либо резких изменений структуры и химического взаимодействия в расплавах в этих температурных интервалах. Энергия активации вязкого течения расплавов изменяется в пределах от 20 до 45 кДж/моль. По температурным зависимостям  $\nu$  определены концентрационные зависимости. На изотермах вязкости и характеристик вязкого течения при изменении концентрации Cu и постоянной концентрации Co (15 ат.%) обнаружены минимумы и максимумы. Первый максимум на концентрационной зависимости  $\nu$  наблюдается при 14 ат.% Cu, ему соответствуют: максимальное значение энергии активации вязкого течения ( $E$ ) и минимальное - предэкспоненциального множителя ( $A$ ). Для второго максимума  $\nu$  при 25 ат.% Cu, также характерны локальный максимум  $E$  и минимум -  $A$ . Увеличение концентрации Co в расплаве при постоянном содержании Cu приводит к монотонному увеличению вязкости, однако в области концентраций 10-12,5 ат.% Co наблюдается небольшой перегиб.

Анализ концентрационного поведения вязкости проводили на основе данных о локальном химическом взаимодействии в системе, полученный с помощью *ab initio* молекулярной динамики.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № РНФ 18-12-00438).

# АНАЛИЗ ФОРМЫ И РАЗМЕРОВ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ДОМЕНОВ В СИЛЬНО АНИЗОТРОПНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

Кешарпу К. К.<sup>1,3</sup>, Григорьев П. Д.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Кафедра теоретической физики и квантовых технологий,  
Национальный исследовательский и технологический университет  
«МИСиС», Москва, 119049.*

<sup>2</sup>*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау,  
Российской академии наук, Черноголовка, 142432.*

<sup>3</sup>*kesharpu.k@misis.ru*

В большинстве слоистых и сильно анизотропных сверхпроводников эффекты сверхпроводимости сначала проявляются вдоль наименее проводящих осей [1-4] при  $T > T_c$ , а затем в других направлениях. Стандартная теория сверхпроводящих флуктуаций не может объяснить это анизотропное начало сверхпроводимости. Мы объяснили это, предполагая, что при  $T > T_c$  возникает гетерогенная сверхпроводимость в виде изолированных островков внутри исходной фазы [3-5]. С понижением температуры объемная доля сверхпроводящей фазы увеличивается за счет увеличения числа и размеров сверхпроводящих островков. Наконец, при  $T = T_c$  фазовая когерентность этих островков устанавливается во всей выборке, что делает систему полностью сверхпроводящей. Для такого рода анизотропных гетерогенных систем с эллипсоидальными включениями произвольной размерности мы вывели аналитические формулы для сопротивления, применив приближения Максвелла-Гарнетта и самосогласованные приближения [3-6]. Результаты согласуются с экспериментальными данными по температурной зависимости анизотропии удельного сопротивления выше  $T_c$  в нескольких слоистых проводниках: FeSe,  $YBa_2Cu_4O_8$ ,  $\beta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> и позволяют оценить размер сверхпроводящих островков, например,  $d \sim 1$  мкм в  $\beta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub>.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-31-27001.

## Литература

1. A. Narayanan, A. Kiswandhi, D. Graf, J. Brooks, and P. Chaikin, Phys. Rev. Lett., **112**, 146402, **2014**

2. N. E. Hussey, K. Nozawa, H. Takagi, S. Adachi, and K. Tanabe, *Phys. Rev.* **B 56**, R11423(R), **1997**
3. P. D. Grigoriev, A. A. Sinchenko, K. K. Kesharpu, A. Shakin, T. I. Mogilyuk et al., *JETP Lett.* **105**, 786, **2017**  
A. A. Sinchenko, P. D. Grigoriev et al., *Phys. Rev. B* **95**, 165120, **2017**
4. S.S. Seidov, K.K. Kesharpu, P.I. Karpov, P.D. Grigoriev, *Phys. Rev.* **B 98**, 014515, **2018**
5. K.K. Kesharpu, P.D. Grigoriev, D.I. Lazeva, T.I. Mogilyuk, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1238**, 012010, **2019**

## РАЗЛИЧНЫЕ КАРТИНЫ ОПИСАНИЯ КЛАСТЕРОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ПРИМЕРЕ СЕРИИ $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$ (TM=Mn, Rh, Ir)

Комлева Е.В.

*Институт физики металлов имени М.Н.Михеева УрО РАН,*

*Екатеринбург*

*komleva@imp.uran.ru*

Для описания электронов в твёрдом теле широко известны две модели – картина локализованных электронов (ЛЭ), в которой он принадлежит конкретному атому, и делокализованных, то есть свободных. В кластерных системах, то есть в соединениях, в структуре которых есть близко расположенные друг к другу атомы переходного металла, может реализоваться смешанное состояние – электроны локализуются не на одном узле решётки, а одновременно на нескольких, но геометрически изолированных от остального кристалла. Это может привести к формированию молекулярных орбиталей (МО), влияющих на свойства системы.

Исследование недавно синтезированного ряда изоструктурных соединений  $\text{Ba}_4\text{NbTM}_3\text{O}_{12}$  (TM=Mn, Rh и Ir), содержащих линейные тримеры переходного металла [1-2], позволяет судить о возможности применения моделей ЛЭ или МО в каждом случае. Оказалось, что  $3d$  система на основе Mn может быть корректно описана в рамках модели ЛЭ. Для иридиевой  $5d$  системы оптимальной является картина МО. В случае  $4d$ -систем (Rh) реализуется пограничная ситуация,

картина МО может быть взята в качестве разумного начального приближения, требующего коррекции [3-4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90073.

#### Литература

1. L.T. Nguyen, T. Kong, and R. J. Cava, Mater. Res. Express **6**, 056108, **2019**
2. L.T. Nguyen and R. J. Cava, Phys. Rev. Materials **3**, 014412, **2019**.
3. S.V. Streltsov and D. I. Khomskii, JETP Lett. **108**, 686, **2018**
4. E.V. Komleva, D.I. Khomskii, and S.V. Streltsov, Phys. Rev. B **102**, 174448, **2020**

## ИЗМЕНЕНИЕ СВОЙСТВ СМАЗОЧНЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Кондратюк Н.Д.<sup>1,2</sup>, Писарев В.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Объединенный Институт Высоких Температур Российской академии наук, Москва, Россия*  
*nidkond@ihed.ras.ru*

Исследование существующих углеводородных жидкостей, а также поиск новых соединений с необходимыми параметрами, представляют большой промышленный интерес, так как углеводороды лежат в основе смазочных и топливных жидкостей. Умение теоретически и вычислительно описывать физико-химические процессы, происходящие в жидкостях при увеличении давлений до нескольких ГПа, позволит дополнить экспериментальный подход.

В докладе будут продемонстрированы методики по молекулярно-динамическому расчету уравнений состояния и коэффициентов переноса для жидких углеводородов [1-8]. Проведено сравнение потенциалов межатомного взаимодействия по их предсказательной способности. Предсказанные без наличия

экспериментальных данных коэффициенты вязкости для нормальных [3,4], разветвленных [5,6] алканов и ароматических соединений [6,7,8] в диапазоне давлений от 0.1 МПа до 1 ГПа совпадают с опубликованными позднее экспериментальными работами. Показан универсальный скейлинг между коэффициентами диффузии и вязкости при давлениях вплоть до 500 МПа [6]. Предприняты попытки исследования процесса аморфизации жидкости давлением.

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

### Литература

1. Н.Д. Кондратюк, Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов, ВМС Сер. А. **58(5)**, 519-531, **2016**
2. N.D. Kondratyuk, G.E. Norman and V.V. Stegailov, J. Chem. Phys. **145(20)**, 204504, **2016**
3. V. Pisarev and N. Kondratyuk. Fluid Phase Equilib., **501**, 112273, **2019**
4. N.D. Kondratyuk and V.V. Pisarev. Fluid Phase Equilib., **498**, 151-159 **2019**
5. N. Kondratyuk, J. Chem. Phys., **151(7)**, 074502, **2019**
6. N. Kondratyuk, D. Lenev and V. Pisarev, J. Chem. Phys, **152**, 191104 **2020**
7. N.D. Kondratyuk, V.V. Pisarev, J.P. Ewen, J. Chem. Phys., **153 (15)**, 154502, **2020**
8. N.D. Kondratyuk, V.V. Pisarev. Fluid Phase Equilib., **544-545**, 113100, **2021**

# ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТОВ ГИБРИДИЗАЦИИ НА КРИТИЧЕСКУЮ ТЕМПЕРАТУРУ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА В МАЙОРАНОВСКИХ НАНОПРОВОДАХ

Копасов А. А., Мельников А. С.

<sup>1</sup>*Институт физики микроструктур РАН, ул. Академическая, д. 7,  
Нижний Новгород, 607680  
kopasov@ipmras.ru*

Поиск майорановских состояний в системах полупроводниковый нанопровод с сильным спиновым расщеплением, спин-орбитальным взаимодействием Рашбы и покрытый слоем сверхпроводника (майорановский нанопровод) [1,2] возродил интерес к изучению сверхпроводящих свойств гибридных структур полупроводник/сверхпроводник (ПП/СП). Необходимым условием для реализации экзотических состояний квазичастиц в таких системах является проникновение сверхпроводящих корреляций из сверхпроводника в полупроводник (сверхпроводящий эффекта близости). Хорошо известно, что при анализе сверхпроводящего эффекта близости необходимо также учитывать и возможное обратное влияние полупроводника на сверхпроводящие свойства оболочки (так называемый обратный эффект близости).

Ранее нами был проанализирован обратный эффект близости для систем ПП/СП в рамках формализма туннельного гамильтониана. Было показано, что наличие сильного парамагнитного эффекта для электронов, туннелирующих в провод, а также особенностей Ван Хофа в электронной плотности состояний в проводе могут приводить к подавлению сверхпроводящих корреляций в сверхпроводящей оболочке в области слабых магнитных полей и к возвратной сверхпроводимости в сильных магнитных полях [3]. Однако, применимость такого подхода ограничена случаем, когда вероятность туннелирования электронов через границу много меньше единицы [4].

Важно отметить, что в последнее время был достигнут значительный прогресс в изготовлении нанопроводов InAs, покрытых тонким слоем сверхпроводящего Al. В частности, величина наведенной щели в таких структурах оказывается порядка сверхпроводящей щели в Al, что свидетельствует о хорошей прозрачности границы ПП/СП [5]. Наличие прозрачной границы также приводит к необходимости изучения эффектов, связанных с



гибридизацией волновых функций квазичастиц в полупроводнике и сверхпроводнике [6-8]. Другими словами, наличие хорошего контакта между полупроводником с сильным спиновым расщеплением и сверхпроводником приводит к изменению граничных условий для волновой функции квазичастиц на интерфейсе, которые оказываются чувствительными к спиновой структуре волновой функции в полупроводнике. Последовательное описание эффектов гибридизации волновых функций может быть получено только за рамками приближения туннельного гамильтониана.

Целью данной работы является исследование эффектов гибридизации волновых функций квазичастиц на величину критической температуры сверхпроводящего перехода в системе многомодовый полупроводниковый провод с сильным спиновым расщеплением, спин-орбитальным взаимодействием Рашбы и частично покрытый сверхпроводящей оболочкой. В рамках формализма уравнений Горькова исследованы зависимости критической температуры сверхпроводящего перехода от величины спинового расщепления и энергии спин-орбитального взаимодействия в полупроводнике при произвольном соотношении числа поперечных мод в оболочке и в полупроводнике.

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

## Литература

1. J. Alicea, Rep. Prog. Phys., **75**, 076501, **2012**
2. S. R. Elliot, M. Franz, Rev. Mod. Phys., **87**, 137, **2015**
3. A. A. Kopasov, I. M. Khaymovich, A. S. Mel'nikov, Beilstein J. Nanotechnol., **9**, 1184, **2018**
4. W. L. McMillan, Phys. Rev., **175**, 537, **1968**
5. W. Chang, S.M. Albrecht, T.S. Jespersen et al., Nature Nanotechnol, **10**, 232, **2015**
6. A. E. Antipov, A. Bargerbos, G.W. Winkler et al., Phys. Rev. X, **8**, 031041, **2018**
7. A. E. G. Mikkelsen, P. Kotetes, P. Krogstrup, K. Flensberg, Phys. Rev. X, **8**, 031040, **2018**
8. B. D. Woods, T. D. Stanescu, S. Das Sarma, Phys. Rev. B, **98**, 035428, **2018**

## ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МИКРОМАГНИТОВ НА ОСНОВЕ FeCoPrDyB

Коплак О.В., Куницына Е.И., Дремова Н.Н.,  
Гапанович М.В., Моргунов Р.Б.

*Институт проблем химической физики, 142432, Черноголовка,  
Россия  
o.koplak@gmail.com*

Сплавы RE-TM-B (RE-редкоземельный металл, TM-переходный метал, B- бор) хорошо зарекомендовывали себя среди спеченных магнитов, за счет большой запасенной магнитной энергии, великолепных термостабильных, коррозионных и механических свойств. Интересным является подход к миниатюризации спеченных магнитов FeCoPrDyB, результатом которого является создание микропроводов, обладающих множеством функциональных свойств [1-7]. Микропровода FeCoPrDyB, получающие методом висящей капли расплава, обладают магнитомягкими свойствами ( $H_c = 10-100$  Oe) при этом демонстрируют прямоугольную петлю гистерезиса, что является подтверждением бистабильности (очень высокой скорости движения доменных границ по микропроводу в критическом магнитном поле) [2].

Наличие двух подрешеток RE-TM открывает широкие возможности для создание ферри-, сперимагнетиков, состояние типа спинного стекла в таких сплавах и тд. Так, например, в микропроводах PrDy-CoFeB был обнаружен спин-переориентационный переход, сопровождающийся многократным уменьшением продольной намагниченности при 245 К в нулевом магнитном поле, что выглядит многообещающим для магнитокалорических приложений, близких к комнатной температуре [3].

Благодаря подбору режима охлаждения капли расплава возможен контроль формы микропровода от полностью цилиндричной до овальной, линзообразной при этом варьируя длину от 1 до 100 мкм, что делает их совместимыми с микроскопическими объектами. В [4] предложен новый метод дизайна вершины микропровода  $\alpha$ -Fe/DyPrFeCoB, приводящий к усилению концентрации магнитного потока. Это позволяет использовать микропровод в качестве магнитных пинцетов, производящих манипулирование магнитомеченными клетками без механического

воздействия.

В случае микропроводов, состоящих из ядра и оболочки критическое значение имеет роль интерфейса. В микропроводах Fe/DyPrFeCoB обнаружен эффект обменного смещения, возникающий на границе между ферромагнитным ядром и ферримагнитной оболочкой. Обменное смещение обеспечивает стабильное начальное состояние микропровода  $\alpha$ -Fe /PrDyCoFeB, используемого в качестве рабочей среды датчика магнитного поля, а также выглядит многообещающим с точки зрения комбинирования магнито-импедансных и магниторезистивных свойств [5].

Предложен подход к управлению процессами перемагничивания в микропроводах FeCoPrDyB с помощью механического воздействия (скрайбирования) [6], лазерного профилирования [7], высокотемпературного отжига [7], нанесения дополнительной оболочки из переходного металла (Fe) (рис. 1).

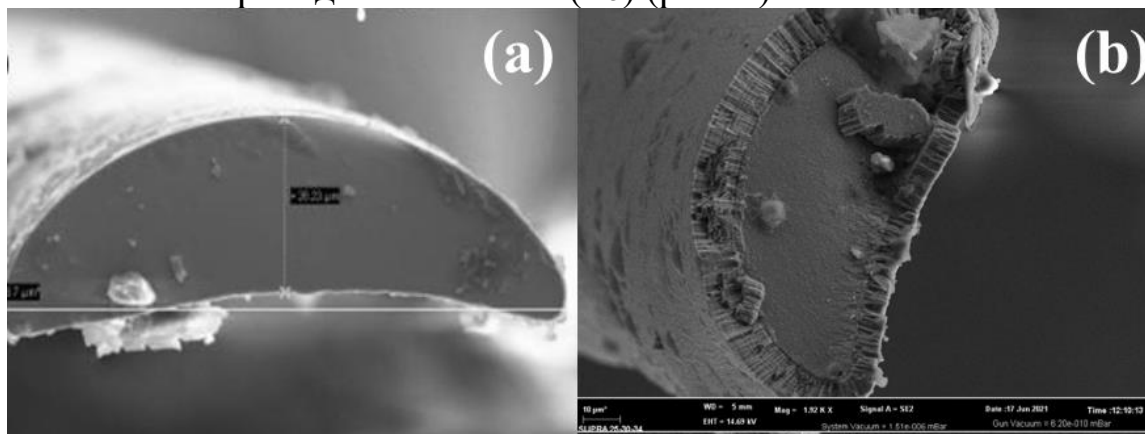


Рис.1. Электронное изображение торца микропровода до (а) и после нанесения слоя железа (чистота 99.99 %).

В аморфно-нанокристаллических микропроводах PrDyCoFeB с напыленным слоем железа на их поверхность при 2 К наблюдается обменное смещение 70 Oe, которое отсутствует в тех же микропроводах до напыления. Знак и величина обменного смещения определяются величиной магнитного поля, приложенного при их охлаждении до 2 К. Это показывает, что причиной смещения является обменное взаимодействие на границе между ферромагнитной фазой  $\alpha$ -Fe и ферримагнитными фазами Dy(CoFe)<sub>2</sub> или Dy(CoFe)<sub>4</sub>B, независимо от способа создания интерфейса ферромагнетик–ферримагнетик.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-32-70025 "Стабильность" и гранта 20-33-90256 «Аспиранты».

1. R.B.Morgunov, et al, JMMM, **497**, 166004, **2020**
2. O.V. Koplak, Phys. Solid State **61**, 2061, **2019**
3. O.V. Koplak, et al., Phys. Solid State, **62**, 1333, **2020**
4. R.B. Morgunov, et al Materials Letters, **273**, 127954, **2020**
5. O.V. Koplak, et al Mat. Sc. and Eng.: B, **263**, 114845, **2021**
6. O.V. Koplak, et al Phys. Solid State **62**, 2272, **2020**
7. Д.В. Королев, Физика твердого тела, **8**, 1105 **2021**

## **ВОДОРОД В МЕЗОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ОПАЛАХ**

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

*Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна Российской академии наук (ИФТТ РАН)*

[korotkova@issp.ac.ru](mailto:korotkova@issp.ac.ru)

Ранее была описана попытка создания нанокластеров водорода в викорном стекле для изучения процессов их кристаллизации и аморфизации при понижении температуры [1]. Как было показано, поставленных целей удалось достичь, однако весь процесс осложнялся выделением водорода при достаточно низких температурах, характерных для этого раствора.

Одним из вариантов решения этой проблемы является создание подобных нанокластеров на основе опаловых матриц диоксида кремния. В данной работе опаловые матрицы состояли из глобул размерами 1670 нм или 1800 нм, имеющих большую удельную поверхность  $\sim 500$  м<sup>2</sup>/г. Это может указывать на то, что глобулы состоят из частиц диоксида кремния, имеющих размеры  $\sim 4$ -5 нм.

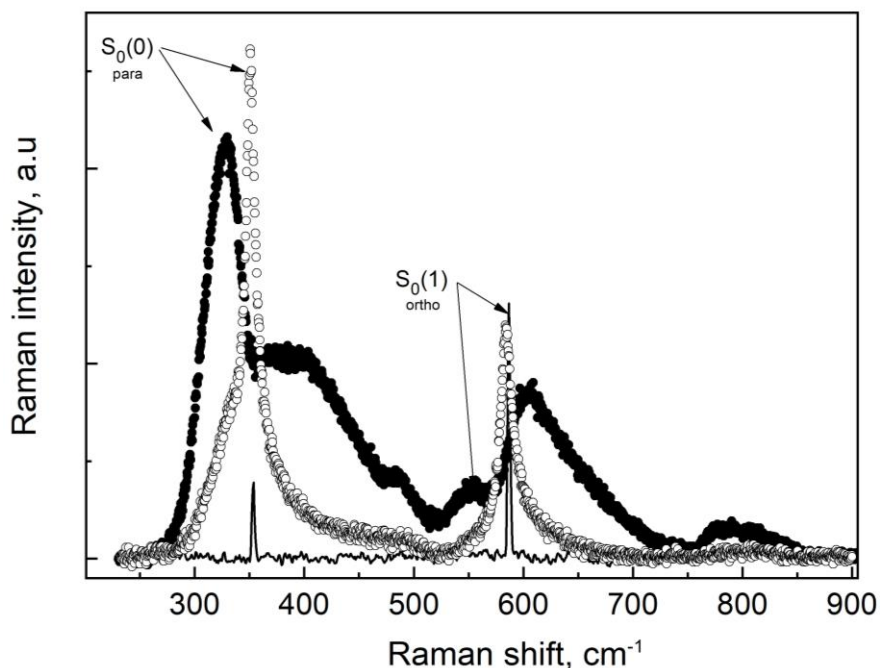


Рисунок 1. Спектры комбинационного рассеяния света гидрированного опала (темные символы), раствора водорода в массивном кварцевом стекле (светлые символы), газообразного водорода (сплошная линия).

Данные материалы подвергались гидрированию при давлении 7,5 ГПа и температуре 140°C, после чего на полученных закаленных образцах определялся состав по водороду методом термодесорбции и изучалось состояние водорода методом комбинационного рассеяния света (КРС). Было обнаружено, что растворимость водорода в таких опаловых матрицах достигает порядка 0,82 моля на 1 моль диоксида кремния. Также, было установлено, что водород растворен в виде молекул, но при этом спектр растворенного водорода очень сильно отличается от спектра водорода массивных образцов кварцевого стекла [2].

Частоты ротационных колебаний водорода в опаловых образцах совпадают с частотами ротационных колебаний свободного водорода (Рис.1), что вероятно указывает на свободное состояние большей части растворившегося водорода и, соответственно, на образование нанокластеров  $H_2$  в опаловых матрицах диоксида кремния. Также определялась энергия активации вылета водорода из данных материалов. Значение энергии активации примерно составило 0,16 эВ на молекулу, что совпало со значением энергии активации распада раствора водорода в массивном кварцевом стекле. Однако если в массивном образце раствор водорода при азотной температуре

сохраняется годами, то для опаловых образцов состав раствора падает на 0,1 моля за несколько месяцев.

Таким образом, полученные результаты показывают возможность создания нанокластеров свободного водорода внутри опаловых матриц диоксида кремния, при этом рассматриваемые нанокластеры способны сохраняться при азотной температуре достаточно долгое время по сравнению с выкорным стеклом.

## Литература

1. Jan De Kinder, August Bouwen, and Dirk Schoemaker, Phys. Rev. B, **52**, 22, **1995**
2. К.Р. Meletov, V.S. Efimchenko, International Journal of Hydrogen Energy, in press, **2021**, DOI:10.1016/j.ijhydene.2021.04.144.

## **ДИНАМИКА АНИЗОТРОПНЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНИХ ВРАЩАЮЩИХСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ**

Корсакова С.А., Крючков Н.П., Яковлев Е.В., Быстров Д.А. и  
С.О. Юрченко  
*МГТУ им. Н. Э. Баумана*  
*sofia.korsakova@gmail.com*

Изучение свойств коллоидных суспензий анизотропных частиц, находящихся во внешних управляющих полях представляет большой интерес для физики мягкой материи [1-6]. Это обусловлено широкой распространенностью анизотропных частиц в живых системах (например бактерии и клетки) и перспективами их использования при разработке новых технологий самосборки микроструктур, 3Д-печати, 3Д-биопечати и микрофлюидики.

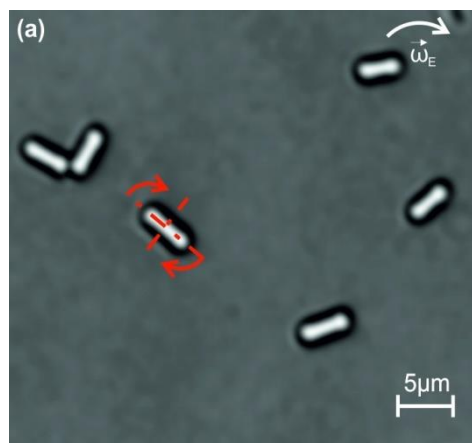


Рисунок 1 Анизотропные частицы во внешнем вращающемся электрическом поле. Направление вращения поля и частиц показано стрелками;

В работе экспериментально изучена динамика движения уединенных коллоидных частиц-палочек, размещенных во внешнем вращающемся электрическом поле [7]. На Рис. 1 представлен пример снимка, сделанного в экспериментах с разряженными суспензиями анизотропных коллоидных частиц. Показано, что при определенных условиях такие частицы начинают вращаться, что позволяет их рассматривать как систему активных частиц (активных ротаторов). Установлено, что частота вращения коллоидных частиц возрастает как с частотой вращения электрического поля, так и с увеличением магнитуды поля. Кроме того, обнаружено, что в условиях анизотропного внешнего поля (поле имеет эллиптический годограф) частицы могут демонстрировать три типа динамики: (1) при малой анизотропии поля наблюдается монотонное вращение палочек с угловыми скоростями, зависящими от угла ориентации; (2) при умеренной анизотропии наблюдается чередование быстрых поворотов и колебаний около выделенного направления; (3) при сильной анизотропии ориентация частиц оказывается захваченной – частицы более не вращаются, их ориентация фиксирована. Для описания наблюдаемых режимов предложена простая математическая модель, результаты использования которой находятся в детальном согласии с экспериментальными.

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

Литература

1. B. Liu et al., Nat Commun **5**, 3092, **2014**
2. B. Rupp et al., Langmuir **34**, 7, 2497–2504, **2018**
3. A. Azari et al., Langmuir **33**, 48, 13834–13840, **2017**
4. I. Martchenko et al., Soft Matter **12**, 8755–8767, **2016**
5. S. L. Biswal et al., Phys. Rev. E **69**, 041406, **2004**
6. F. Ma et al., Anisotropic Particle Assemblies, p. 131–165. Elsevier, **2018**
7. E.V. Yakovlev et al., Scientific reports **7**, 1, 1–10, **2017**

## АНИЗОТРОПИЯ РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ $\text{HoV}_{12}$ и $\text{ErV}_{12}$

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

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

<sup>2</sup>*Институт проблем материаловедения имени И.М. Францевича  
Национальной академии наук Украины*

[krasikokirill@yandex.ru](mailto:krasikokirill@yandex.ru)

Магнетики с фрустрированным основным магнитным состоянием привлекают существенное внимание в силу набора аномальных свойств, потенциально применимых на практике. Среди них антиферромагнетики из семейства редкоземельных додекаборидов  $\text{RV}_{12}$  ( $R = \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$ ) представляют особый интерес, так как, обладая сравнительно простой ГЦК решеткой, демонстрируют сложную несоразмерную магнитную структуру с антиферромагнитным упорядочением при  $T < T_N$ . Недавно было обнаружено формирование динамических зарядовых страйпов вдоль направления  $[110]$  в немагнитном реперном соединении  $\text{LuV}_{12}$  [1], возникающих в результате динамического кооперативного эффекта Яна-Теллера на кластерах  $\text{V}_{12}$ . Подобная электронная неустойчивость должна присутствовать в  $\text{HoV}_{12}$  и  $\text{ErV}_{12}$ , так как она присуща именно борной подрешетке. В связи с этим, отдельный интерес представляет изучение механизмов рассеяния носителей заряда в таких системах с одновременным наличием несоразмерной магнитной структуры и динамических зарядовых страйпов.



Ранее было показано [2], что в  $\text{HoV}_{12}$  зависимости магнетосопротивления (МС) от магнитного поля можно описать суммой линейного положительного и квадратичного отрицательного вкладов во внешнем магнитном поле. Коэффициенты А и В, которые определяют два различных механизма рассеяния носителей заряда на (i) волне спиновой плотности и (ii) локальных 4f-5d спиновых флуктуациях, были получены и детально проанализированы. В этой работе приводится аналогичный анализ с разделением вкладов для  $\text{ErV}_{12}$  и сравнение эволюции механизмов рассеяния при изменении температуры и магнитного поля для  $\text{HoV}_{12}$  и  $\text{ErV}_{12}$ .

В работе представлены результаты измерения удельного сопротивления  $\text{HoV}_{12}$  и  $\text{ErV}_{12}$  в диапазоне температур 1.7-10К, в магнитном поле до 80кЭ, направленном вдоль основных осей в ГЦК кристалле ( $\mathbf{H}||[001]$ ,  $\mathbf{H}||[110]$  и  $\mathbf{H}||[111]$ ), а также угловых зависимостей магнетосопротивления. Измерение удельного сопротивления проводилось на автоматизированной оригинальной установке для гальваномагнитных исследований в ИОФ РАН. Использовался стандартный четырехконтактный метод измерения сопротивления на постоянном токе с коммутацией тока через образец.

Обнаруженная сильная угловая анизотропия МС и коэффициентов А и В (линейный положительный и квадратичный отрицательный вклады), крайне нетипичная для ГЦК кристалла, объясняется следствием сильной перенормировки косвенного РККИ-обмена через электроны проводимости из-за перераспределения носителей заряда в квантовые колебания (динамические полосы заряда), направленные вдоль  $[110]$ .

## Литература

1. N. V. Bolotina et al., J. Phys. Condens. Matter, **30**(26), 265402, **2018**
2. K. M. Krasikov et al., Solid State Sci., **104**, 106253, **2020**

## РЕОРИЕНТАЦИЯ МАГНИТНЫХ ГЕЛИКОИДОВ MnSi В МАГНИТНОМ ПОЛЕ\*

Краснорусский В. Н.<sup>1</sup>, Нарожный В. Н.<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>*Независимый исследователь, Троицк*

*krasnorusky@mail.ru*

Детально изучена намагниченность кубического монокристалла MnSi ниже поля переориентации магнитных доменов  $H_{C1}$ . Измерения проводились на вибрационном магнитометре для трех направлений магнитного поля  $H \parallel [001]$ ,  $[111]$ ,  $[110]$ .

Обнаружено существенно анизотропное поведение намагниченности MnSi при  $H < H_{C1}$ . Проведенный анализ показал, что данное поведение связано, по меньшей мере, с двумя факторами. Во-первых, с резко выраженной анизотропией поля  $H_{C1}(T)$ . Так отношение  $H_{C1}^{[001]}/H_{C1}^{[111]}$  растет от 3 при  $T = 5.5$  К до 10 при  $T \rightarrow T_N = 28.8$  К [1,2]. Во-вторых, анизотропия связана с различным характером поворота магнитных геликоидов из исходного многодоменного состояния (MDS) к состоянию с осью геликоида, направленной вдоль магнитного поля с одной стороны для  $H \parallel [111]$ , и для  $H \parallel [001]$ ,  $H \parallel [110]$  - с другой.

Экспериментально определенные данные по вращению геликоидов в магнитном поле были сравнены с моделью, предложенной Плюмером и Волкером [3] (см. рис.1). Для этого было использовано три параметра:  $H_{C1}$ ,  $[\partial M/\partial H]_{MDS}$  и  $[\partial M/\partial H]_{SDS}$ . Поле перехода  $H_{C1}$  соответствует максимуму экспериментально определенной магнитной восприимчивости в MDS.  $[\partial M/\partial H]_{MDS}$  обозначает начальную магнитную восприимчивость, определенную при  $H \rightarrow 0$  в состоянии MDS.  $[\partial M/\partial H]_{SDS}$  соответствует магнитной восприимчивости в магнитно-однодоменном состоянии (SDS) и может быть определено из кривых намагничивания  $M(H)$  в поле  $H > H_{C1}$  [1,2], когда и реализуется такое состояние.

В случае невозмущенного исходного состояния для  $H \parallel [001]$  и  $H \parallel [110]$  увеличение магнитного поля вплоть до  $H_{C1}$  приводит к постепенному увеличению магнитной восприимчивости (рис.1). Экспериментальные данные неплохо описываются зависимостями, предложенными в [3] (рис.1). В тоже время, для  $H \parallel [111]$  магнитная восприимчивость исходно невозмущенного состояния остается практически неизменной вплоть до  $H \sim H_{C1}/2$ . Вращение доменов

происходит только в области полей  $H_{C1}(T)/2 < H < H_{C1}(T)$ . В этом случае кривые  $M(H)$  и  $dM/dH$  могут быть описаны зависимостями из [3] лишь весьма грубо.

Измерения  $M(H)$  для  $H \parallel [110]$  были выполнены для случая, когда образец был первоначально переведен в магнитное SDS состояние путем изменения поля  $H \parallel [111]$  от 0 до 11 кЭ и обратно в 0 Э [1,2]. Далее образец поворачивался на  $35^\circ$  в положение  $H \parallel [110]$  при той же температуре. Отношение наклона начального участка кривой  $M(H)$  в этом случае к наклону в состоянии SDS в поле  $H > H_{C1}$  легко опреде-

лить, зная соотношение  $\chi_{\parallel} / \chi_{\perp} \approx 0.56$  при  $T = 5.5$  К [ $\chi_{\parallel}$  и  $\chi_{\perp}$  соответствует восприимчивости соответственно при направлении  $H_{\parallel}$  и  $H_{\perp}$  плоскости (111), содержащей магнитные моменты]. Это соотношение составляет 0.88, что близко к экспериментально определенному значению 0.84. Этот факт может служить дополнительным свидетельством в пользу сохранения монокристалла MnSi в SDS состоянии даже в нулевом поле после 1) приложения  $H > H_{C1}$  и 2) выведения поля в 0 Э при  $H \parallel [111]$ .

\*Настоящее исследование было выполнено в ИФВД РАН.

## Литература

1. В.Н. Нарожный, В.Н. Краснорусский, ЖЭТФ, **143**, 906, **2013**
2. V.N. Narozhnyi, V.N. Krasnorussky, Phys. Rev. B, **91**, 134403, **2015**
3. M.L. Plumer, M.B. Walker, J. Phys. C: Solid State Phys. **14**, 4689, **1981**

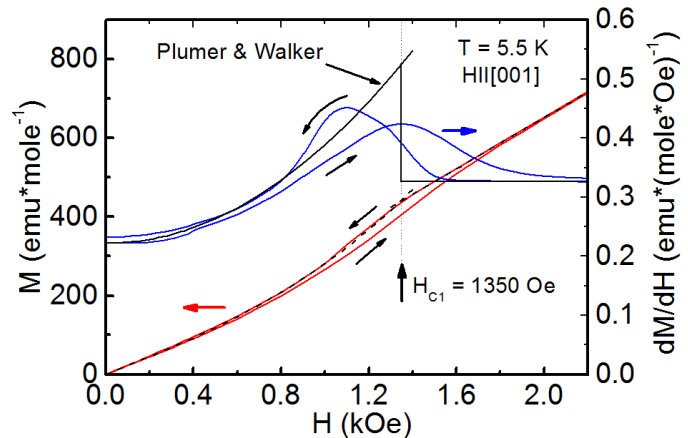


Рис. 1. Полевая зависимость намагниченности MnSi (красная кривая), измеренная при  $T = 5.5$  К для  $H \parallel [001]$  (левая шкала), магнитная восприимчивость  $dM/dH$  (синяя кривая, правая шкала), а также теоретическая зависимость  $M(H)$  (пунктирная линия) и  $dM/dH$  (сплошная черная, правая шкала) по модели, представленной в [3].

# КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В АКТИВНЫХ ЖИДКОСТЯХ: МИКРОПОТОКИ И НАРУШЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНОГО РАВНОРАСПРЕДЕЛЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ

Крючков Н.П., Юрченко С.О.  
МГТУ им. Н.Э. Баумана  
[kruchkov\\_nkt@mail.ru](mailto:kruchkov_nkt@mail.ru)

Коллективная динамика самодвижущихся частиц (активные системы и активная мягкая материя) привлекают все больше внимания исследователей из-за широкой распространенности в природе: бактерии [1], движущиеся клетки [2], индивидуальное или коллективное поведение животных [1]. Кроме того, искусственно созданные самодвижущиеся частицы интересны с точки зрения перспективных практических применений, включающих: медицинские приложения [3], управляемая самоорганизация материалов [4], очистка окружающей среды [5] и создание микророботов [6]. Несмотря на значительные усилия, направленные на описание активных систем, понимание роли активности в коллективной динамике активных систем остается сложной и нерешенной проблемой. В частности, до сих пор практически не исследовалось влияние активности частиц на спектры элементарных возбуждений, особенно в случае жидкостей.

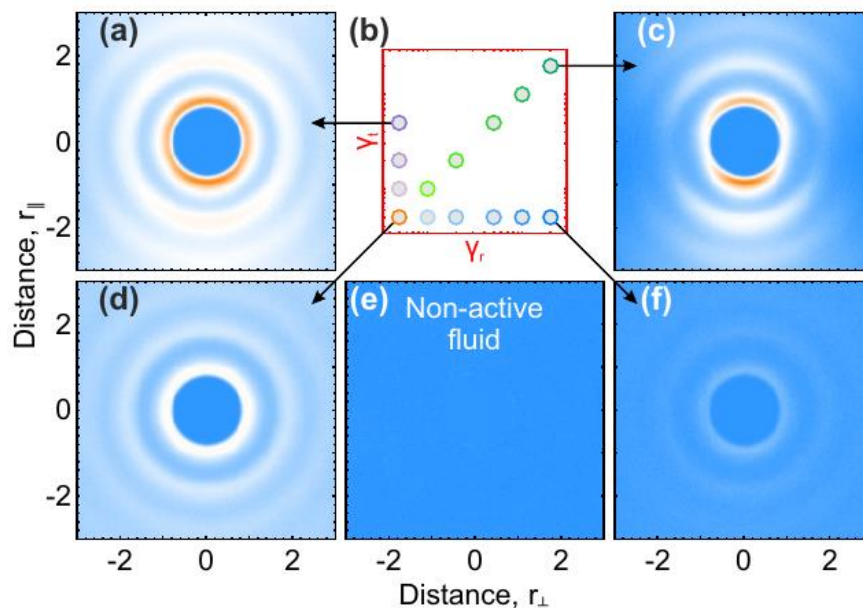


Рис.1 Пространственные корреляции скорость-скорость, наблюдаемые в активных двумерных жидкостях.

В настоящей работе рассчитаны спектры элементарных возбуждений для двумерных жидкостей, состоящих из активных частиц, динамика которых описывается уравнением Ланжевена. Показано, что активность приводит к нарушению равномерного распределения спектра кинетической энергии в обратном пространстве и между различными поляризациями. Это связано с возникновением локальных корреляций скорость-скорость, которые отсутствуют в равновесных жидкостях неактивных частиц. Примеры наблюдаемых корреляций представлены на Рис.1. Обнаруженное явление напоминает мезоскопическую турбулентность [7], однако, в отличие от нее реализуется на более коротких длинах волн и не сопровождается возникновением метастабильных диссипативных структур – вихрей.

Полученные результаты раскрывают ранее неизвестные особенности микроскопической динамики в активных жидкостях и открывают путь для будущих исследований взаимосвязи между явлениями на разных масштабах.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ 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. H. H. Wensink et al., *Proceedings of the National Academy of Sciences* **109**, 14308, **2012**

# СТРУКТУРА И ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

Борик М.А.<sup>1</sup>, Кораблёва Г.М.<sup>1,2</sup>, Кулебякин А.В.<sup>1</sup>, Курицына И.Е.<sup>1,2</sup>,  
Ломонова Е.Е.<sup>1</sup>, Мызина В.А.<sup>1</sup>, Табачкова Н.Ю.<sup>1,3</sup>, Числов А.С.<sup>1,3</sup>

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

<sup>2</sup>*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН*

<sup>3</sup>*Национальный исследовательский технологический университет  
«МИСиС»*

*kulebyakin@lst.gpi.ru*

Диоксид циркония является одним из наиболее известных твердых электролитов, который используется в целом ряде электрохимических устройств, работающих при высоких температурах. Наибольшая проводимость наблюдается в твердых растворах  $ZrO_2 - Sc_2O_3$ , однако их транспортные характеристики нестабильны в течение длительного времени работы устройства, вследствие присутствия в этой системе метастабильных фаз. Дополнительное легирование примесями редкоземельных элементов позволяет добиться стабильности фазового состава, структуры и свойств данных материалов.

Целью настоящей работы является синтез монокристаллов твердых растворов  $(ZrO_2)_{1-x-y}(Sc_2O_3)_x(Yb_2O_3)_y$ ,  $(ZrO_2)_{1-x-y}(Sc_2O_3)_x(Tb_2O_3)_y$  ( $x=0.08-0.10$ ;  $y=0.01-0.02$ ) и сравнение их фазового состава, структуры и транспортных характеристик.

Кристаллы были выращены методом направленной кристаллизации расплава в холодном контейнере с использованием прямого высокочастотного нагрева. Исследования фазового состава выполняли методами комбинационного рассеяния света и рентгенофазового анализа. Проводимость кристаллов измеряли методом импедансной спектроскопии.

Показано, что максимальную величину проводимости из всех исследуемых составов имели кристаллы 9Sc1YbSZ и 9Sc1TbSZ. Данные кристаллы были однофазные, имели тетрагональную структуру, характерную для  $t''$ -фазы и обладали стабильностью свойств при высокой температуре.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-72-10113).

## ДИНАМИКА ЭКСИТОНОВ В НАНОКРИСТАЛЛАХ ПЕРОВСКИТОВ

Кулебякина Е.В., Скориков М.Л., Е.В. Колобкова, В.В. Белых  
*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва*  
*Университет ИТМО, Санкт-Петербург 199034, Россия*  
*Санкт-Петербургский государственный технологический институт,*  
*Санкт-Петербург 199034, Россия*  
*eiscyna@bk.ru*

Перовскиты – перспективный материал для создания высокоэффективных излучателей света, детекторов рентгеновских и гамма-лучей и т.п. Интерес к перовскитам значительно вырос в последнее десятилетие вследствие открытия их рекордных фотоэлектрических, оптоэлектронных и оптических свойств. Было установлено, что данный материал обладает большим коэффициентом преобразования солнечной энергии в электрическую, по сравнению с изделиями на основе кремния, следовательно, является наиболее перспективным для солнечной энергетики.

В настоящей работе представлены результаты исследования спектрально-люминесцентных и кинетических свойств нанокристаллов перовскитов в стекле  $\text{CsPbX}_3$ , где  $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$ . Образцы помещались в гелиевый оптический криостат с регулировкой температуры. Измерения проводились в диапазоне температур от 6 до 35 К. Возбуждение образца осуществлялось пикосекундными импульсами Ti-сапфирового лазера. Динамика фотолюминесценции данных структур характеризуется наличием быстрой и медленной компонент. При увеличении температуры возрастает вклад медленной компоненты, при этом уменьшается время ее затухания. Такое поведение свидетельствует о наличии темнового экситона, который является нижним по энергии состоянием системы.

Работа выполнена при финансовой Правительства Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-598 в ФИАН).

# КОНЦЕПТ УПРАВЛЯЕМОЙ САМОСБОРКИ МЯГКОЙ МАТЕРИИ В ПРОСТРАНСТВЕННО ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И СВЕТОВЫХ ПОЛЯХ

Либет П. А., Яковлев Е.В., Юрченко С.О.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана*

[\*libetpa@gmail.com\*](mailto:libetpa@gmail.com)

Область самосборки мягких коллоидных материалов с регулируемым взаимодействием привлекает интерес научного сообщества. На сегодняшний день применяются различные подходы к управлению взаимодействием между частицами в растворах, например при помощи внешних вращающихся электрических [1], магнитных [2] и оптических полей [3], воздействия на частицы с помощью полей температуры [4], давления [5] и т.д.

Перспективным является случай комбинирования нескольких типов взаимодействий. В настоящей работе решалась задача разработки гибридной системы управления межчастичным взаимодействием в коллоидных системах при помощи одновременно вращающихся электрических полей и локализованного оптического излучения. Комбинация двух типов взаимодействия открывает широкий спектр возможностей для фундаментальных и прикладных исследований.

В работе приведены детали конструкционного анализа, описаны технологические трудности, с которыми можно столкнуться при создании экспериментальной системы, а также показаны результаты численного моделирования электрических полей, создаваемых установкой.

На Рис. 1 показаны различные конфигурации наконечника с электродами – электро-светового пера. Под каждой конфигурацией приведен профиль электрического поля, создаваемый конкретной формой пера. Качественный и количественный анализ различных конфигураций позволил определить оптимальные геометрические параметры наконечника и электродов.

Особый интерес представляет конфигурация, представленная на Рис. 1 (а). Особенностью данной конфигурации является особый профиль электрического поля с локальным минимумом в центре и кольцевым максимумом поля на периферии.



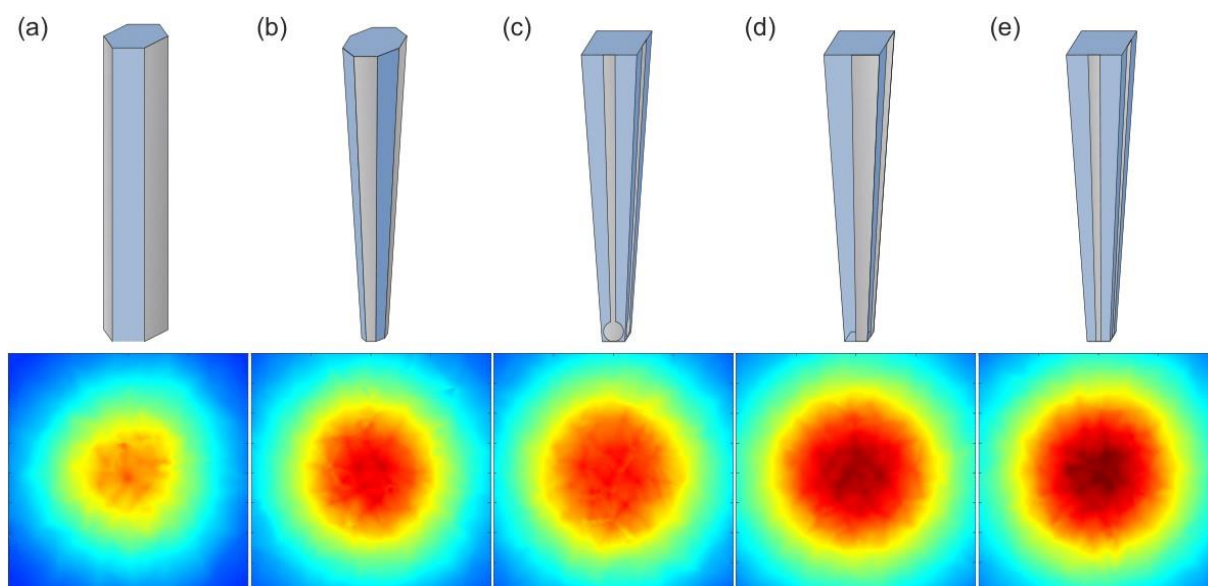


Рис. 1. Различные конфигурации электро-светового пера: (a) шестиугольная призма, (b) восьмиугольная усечённая пирамида, (c) четырёхугольная усечённая пирамида с округлыми электродами, (d) четырёхугольная усечённая пирамида с электродами, нанесёнными на половину грани, (e) усечённая четырёхугольная пирамида с тонким электродом по центру грани.

Конфигурация, представленная на Рис. 1 (d), оказалась наиболее подходящим вариантом, так как полученный профиль электрического поля удовлетворяет необходимым требованиям однородности и интенсивности, а технологически данную конфигурацию наиболее просто реализовать. Во всех конфигурациях толщина электродов составляет  $\approx 100$  нм.

Исследование выполнено при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э. Баумана.

### Литература

1. E. V. Yakovlev et al. *Sci Rep*, **7**, 13727, **2017**
2. A. Snezhko, I. S. Aranson, *Nature Mater*, **10**, 698–703, **2011**
3. J. P. Hoogenboom et al. *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 4828, **2002**
4. M. R. Dreher et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 687–694, **2008**
5. W. S. Hung et al. *Carbon*, **68**, 670-677, **2014**

## МИКРОЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВ И МИКРОВКЛЮЧЕНИЯ В СИНТЕТИЧЕСКОМ КАРБИДЕ КРЕМНИЯ

Литасов К. Д., Каги Х., Хирата Т.

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

*Токийский Университет, Токио, Япония*

*litasov@hppi.troitsk.ru*

Карбид кремния – один из наиболее значимых и всесторонне изученных технологических материалов (напр., [1]). Он имеет широкое применение в качестве абразива, наполнителя огнеупоров и керамики, в микроэлектронике и нанотехнологиях. Кроме этого, он является классическим материалом в кристаллографии, образующим многочисленные политипы. SiC синтезируют в основном методом электродуговой плавки в печи Ачесона из смеси песка с нефтяным коксом и железной стружки. Высокочистый SiC получают путем осаждения из паров в атмосфере аргона в процессе Лели. В данной работе мы исследовали SiC нескольких производителей, включая образцы, полученные обоими методами Ачесона и Лели. Ранее исследовали содержания микроэлементов только в валовых составах порошков SiC, которые захватывают и микровключения в пробах (напр., [2-3], что не отражает чистоту самих кристаллов SiC.

Состав микровключений исследовали в полированных кристаллах размером до 1-2 мм на электронном сканирующем микроскопе с энергодисперсионной приставкой. Данные по микроэлементному составу были получены с использованием лазерной абляционной масс-спектрометрии индуктивно-связанной плазмы (LA-ICP-MS) с фемтосекундной лазерной абляцией, которая позволяет получать высокоомогенный тонкодисперсный материал для анализа с испарением вещества при минимальном уровне нагрева, в Геохимическом исследовательском центре Токийского университета (Япония). Использовался квадрупольный масс-спектрометр iCAP Qc (Thermo Scientific). Концентрации элементов рассчитывали путем сравнения интенсивности элементов из образца алмаза и стандартного стекла NIST-612. Минимальный уровень определяемых концентраций микроэлементов составляет 1 ppb.

Основу микровключений в SiC составляют металлические фазы, гораздо реже встречаются SiO<sub>2</sub>, Si<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O, графит. Среди металлических включений преобладают Si-Fe-Ti– сплавы. Логично предположить, что специфика состава включений связана с примесями в источнике

SiO<sub>2</sub> или нефтяном коксе в стартовой загрузке. Большинство микропримесей в стартовой смеси будет накапливаться в остаточных металлических расплавах, которые захватываются растущими кристаллами SiC. Данные по SiC разных производителей (Россия, Китай, Япония, Европа) будут показаны в полноформатных публикациях, но можно отметить, что они сильно пересекаются между собой. Наиболее частыми примесями к системе Si-Fe-Ti являются Al, V, Mn, Ni. Реже встречаются сплавы, содержащие REE, Th, U, Ca, Ba.

Уровень содержания микропримесей большинства отмеченных выше элементов, включая Fe и Ti, в оптически чистых кристаллах SiC редко превышает 1 ppm. Максимальные содержания Fe, Ti, V достигают 30 ppm. Даже эти примеси вряд ли являются структурными, а скорее представляют захваченные микровключения размером менее 0.1 мкм. Основными примесями, которые регистрируются в кристаллах SiC являются Al (до 300-500 ppm), B (<40 ppm), Na (<45 ppm) и Zr (<18 ppm). Цвет кристаллов SiC (темно-синий, зеленый, желтый, бесцветный) практически не зависит от содержания примесей. Кристаллы SiC, синтезированные по методу Лели, имеют высокую чистоту и содержат <10 ppm Al и <4 ppm B. Содержания Al и B не коррелируют с содержаниями переходных металлов и, скорее всего, представляют структурные примеси в SiC.

Работа поддержана грантом РФФИ-Япония № 21-55-50004.

## Литература

1. Гнесин, Г.Г., Карбидокремниевые материалы. М.: Металлургия, 216 с., **1977**
2. Pilger, C. et al., Fresenius J. Anal. Chem., **351**, 110-116, **1995**
3. Machida, R. et al., Analytical Sciences, **33**, 537–544, **2017**

## СИНТЕТИЧЕСКИЙ АЛМАЗ «КАРБОНАДО» И МИКРОАЛМАЗЫ ИЗ МЕТЕОРИТОВ

Литасов К. Д., Степанов К. М., Менлембетов А. Р.,  
Филоненко В. П., Шацкий А. Ф.

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

Алмаз синтетический поликристаллический «карбонадо» (АСПК) был получен в ИФВД РАН в конце 60-х годов [1]. Была отработана методика импульсного синтеза алмаза при давлениях 6-9 ГПа и кратковременном (импульсном) нагреве до высоких температур. Стандартная загрузка опыта представляла стержень металла-катализатора окруженного графитовой заготовкой, капсулой изолятором и графитовым нагревателем. Наиболее качественный синтез происходил при использовании катализатора  $Ni_{80}Cr_{20}$ . Детальных литературных данных по синтетическому «карбонадо» достаточно мало (напр., [2]), поэтому мы возобновили синтез «карбонадо» с использованием различных катализаторов с целью получить поликристаллы более высокого качества и более детально изучить физические процессы, происходящие во время синтеза и имеющие важное фундаментальное значение, в том числе для объяснения происхождения природных алмазов ударного происхождения.

В результате экспериментов при 8 ГПа и 1600-2000 °С были получены образцы «карбонадо» с использованием Ni-Cr, Fe-Ni и Co катализаторов. Синтез идет очень быстро и полная трансформация графитовой заготовки в алмаз происходит в течение от долей секунды до нескольких секунд. При использовании Ni-Cr катализатора получаются достаточно однородные агрегаты «карбонадо» с размером зерна алмаза не более 1 мкм, при этом вблизи катализатора размер зерен достигает нескольких мкм. Известны оценки высоких скоростей роста кристаллов на начальных этапах кристаллизации алмаза (до 30-60 мкм/с [3]), однако они не верифицировались более поздними исследованиями. Тем не менее эти данные указывают на возможность быстрого формирования достаточно крупных кристаллов алмаза. В экспериментальных образцах рост кристаллов ограничен также недостатком пространства из-за массовой нуклеации кристаллитов алмаза.

В метеоритном веществе алмаз ударного происхождения найден в большом количестве в урейлитах – специфической группе ахондритов, состоящих из оливина и пироксена с большим количеством интерстиционных углеродных агрегатов (до 6-8 мас.%), участков подплавления и следовыми количествами Fe-Ni-металла (до 1-2 мас.%). Углеродные агрегаты могут быть как чисто графитовыми, так и состоящими из нанокристаллического алмаза или алмаз-лонсдейлит-графитовых сростков. Вместе с тем, во многих углеродных агрегатах размер кристаллов алмаза может достигать десятков мкм. Самый крупный алмаз до 100 мкм найден в урейлите Northwest Africa 7983 [4]. Находки крупных кристаллов в десятки мкм позволили выдвинуть гипотезу глубинного происхождения алмаза в урейлитах и кристаллизации в статических условиях при РТ-параметрах, сходных с таковыми для земных алмазов (>6 ГПа, 1300-1500 °С). Тем не менее, явные следы ударного происхождения урейлитов не позволяют считать эту гипотезу заслуживающей внимания. Кристаллизация алмаза в урейлитах возможна в результате длительных воздействий пиковых давлений после прохождения ударной волны, которые могут достигать нескольких секунд при условии крупных размеров сталкивающихся тел [5]. На эту возможность косвенно указывают результаты экспериментов по импульсному синтезу «карбонадо», хотя вопрос о росте кристаллов до 100 мкм в ударном процессе все же остается открытым. Возможным объяснением является участие углеродсодержащего флюида в процессе кристаллизации алмаза в урейлитах, который создает свободное пространства для быстрого роста крупных кристаллов, однако необходимы дополнительные экспериментальные подтверждения этой гипотезы.

## Литература

1. Верещагин, Л. Ф. и др., Докл. АН СССР, **185** (3), 555–556, **1969**
2. Лаптев, А.И. и др., Известия вузов. Цветная металлургия, № 6, 48-52, **2012**
3. Безруков, Г. Н. и др., Докл. АН СССР, **200** (5), 1088–1091, **1971**
4. Nestola, F. et al., Proc. Natl. Acad. Sci., **117** (41), 25310–25318, **2020**
5. P. Gillet, P., El Goresy, A., Annu. Rev. Earth Planet. Sci., **41**, 257–285, **2013**

# СТРУКТУРНАЯ И ТЕРМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ МОНОГЕРМАНИДОВ ТИПА В20 СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Магницкая М. В.<sup>1</sup>, Щелкачев Н. М.<sup>1</sup>,  
Камаева Л. В.<sup>2,1</sup>, Цвященко А. В.<sup>1,3</sup>

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

<sup>2</sup> Физико-технический институт УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск

<sup>3</sup> Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва

*magnita@yandex.ru*

Моногерманиды переходных металлов с нецентросимметричной структурой В20 вызывают интерес исследователей (см., например, [1]), поскольку они представляют собой перспективную основу для разработки новых термоэлектриков и материалов, интересных для спинтроники. В работе исследовались стабильность и фазовые превращения в синтезированных при высоком давлении (метод синтеза описан в работе [2]) фазах типа В20 в системах FeGe, MnGe и RhGe – как теоретически на основе *ab initio* расчетов методом функционала плотности, так и экспериментально с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

С использованием генетического алгоритма выполнен эволюционный поиск наиболее энергетически выгодных полиморфных модификаций, для которых затем в рамках квазигармонического приближения определены области стабильности на фазовой диаграмме давление–температура ( $P$ ,  $T$ ) (для RhGe см. рис. 1). Из наших расчетов следует, что для заданного исходного состава существование некоторой структуры при конечных температурах (и давлениях) может быть эффективно установлено путем эволюционного поиска при  $T = 0$ , если эта структура присутствует в выходном списке низколежащих состояний.

Расчетное основное состояние немагнитного MnGe представляет собой гипотетическую тетрагональную структуру, необычную для соединений этого класса. Для FeGe и MnGe в магнитном состоянии наш эволюционный поиск дает один и тот же набор предпочтительных фаз. В случае FeGe этот результат согласуется с имеющейся информацией, в то время как для MnGe найдены новые экваторные фазы в дополнение к известной метастабильной фазе высокого давления типа В20 [2].

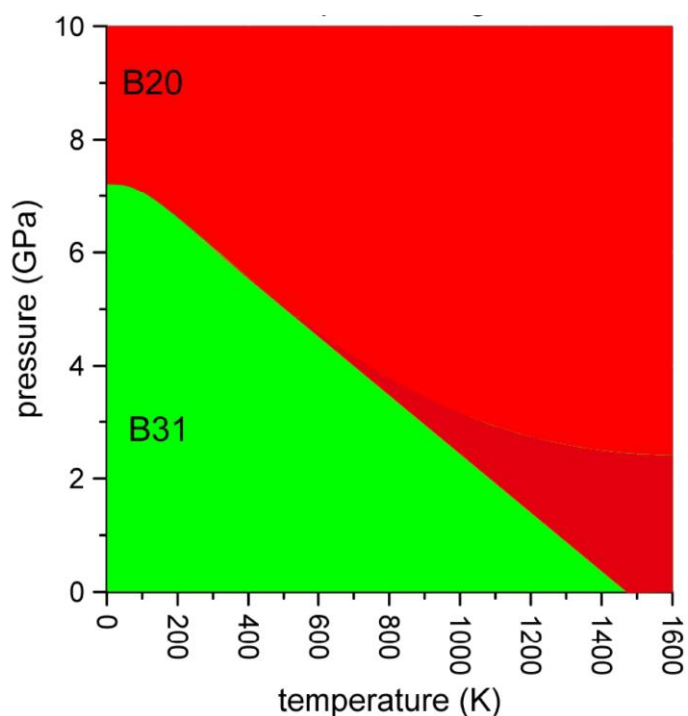


Рис. 1. Расчетная  $P$ – $T$  фазовая диаграмма RhGe.

Из измеренных нами ДСК-термограмм были определены температуры фазовых превращений, которые сравнивались с известными диаграммами равновесных состояний. Эксперименты проводились при нагреве в интервале температур от 310 до 1573 К и последующем охлаждении со скоростью 10 К/мин. Был проведен рентгеноструктурный анализ как исходных образцов, полученных при высоких давлениях, так и образцов после ДСК-измерений.

FeGe и MnGe имеют качественно схожие термограммы, в то время как RhGe отличается от них как по найденной иерархии структур, так и по виду ДСК-кривой. Эксперименты ДСК показывают, что исследованные метастабильные фазы по своим свойствам заметно отличаются от аналогов, полученных другими методами, например, механическим сплавлением. Их поведение при нагревании существенно зависит от метода приготовления и истории образца.

Авторы выражают благодарность за поддержку Российскому научному фонду (гранты РНФ № 18-12-00438 и № 17-12-01050).

#### Литература

1. N.M. Chtchelkatchev, M.V. Magnitskaya, V.A. Sidorov et al., Pure Appl. Chem., **91**, 941, **2019**
2. A. Tsvyashchenko et al., Solid State Phenom. **190**, 225, **2012**

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАГНИТООПТИЧЕСКОГО ПАРАМЕТРА $Q$ ПО ДАННЫМ МАГНИТООПТИЧЕСКОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ

Максимова О. А.<sup>1,2</sup> Овчинников С. Г.<sup>1,2</sup> Лященко С. А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН;*

<sup>2</sup> *Сибирский федеральный университет*  
[maximo.a@mail.ru](mailto:maximo.a@mail.ru)

Магнитооптический параметр – это характеристика намагниченного ферромагнитного материала, также называемая параметром Фохта, являющаяся комплексной величиной  $Q = Q_1 - iQ_2$ . Согласно работам [1-3] параметр  $Q$  пропорционален намагниченности и входит в тензор диэлектрической проницаемости среды, как множитель в недиагональной компоненте  $\varepsilon_{xy} = -iQ\varepsilon_{xx}$  [1-3]. Зная значение магнитооптического параметра, можно рассчитать различные магнитооптические эффекты, такие как магнитный круговой дихроизм, различные магнитооптические эффекты Керра, эффект Фарадея, эффект Фохта.

Обычно классическая эллипсометрия используется для нахождения диагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости среды, а для нахождения недиагональных компонент необходимо прибегать к дополнительным исследованиям, например, использовать СКВИД. В то же время метод магнитоэллипсометрии [4], объединяющий классическую эллипсометрию и измерения в экваториальной геометрии магнитооптического эффекта Керра, позволяет в рамках одной установки, внутри сверхвысоковакуумной ростовой камеры проводить измерения эллипсометрических углов  $\psi$  и  $\Delta$  без приложения магнитного поля, а также их изменений  $\delta\psi$  и  $\delta\Delta$  при приложении внешнего магнитного поля. Соответственно, при обработке магнитоэллипсометрических экспериментальных данных должна быть возможность получить величину магнитооптического параметра.

Нами разработаны алгоритмы, позволяющие из экспериментальных данных получить значение комплексного магнитооптического параметра без использования численных методов. Эти алгоритмы работают для образцов, толщина которых превышает глубину проникновения зондирующего излучения на



данной частоте, а также могут применяться к более тонким структурам с целью оценить величину магнитооптического параметра и использования полученной величины  $Q$  в качестве начальной точки при проведении уточняющего численного расчета. Алгоритм для изотропного образца [5] в качестве начальных данных требует значения  $\psi$ ,  $\Delta$ ,  $\delta\psi$ ,  $\delta\Delta$ , а также угол падения света на образец, величину коэффициента преломления внешней среды. Алгоритм для анизотропного образца требует те же начальные данные, плюс коэффициенты преломления исследуемого образца в и вне плоскости образца.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №21-12-00226, <https://rscf.ru/project/21-12-00226/>.

## Литература

1. R. Rauer, G. Neuber, J. Kunze, J. Bäckström, M. Rübhausen. Review of Scientific instruments **76**, 023910, **2005**
2. G. Neuber, R. Rauer, J. Kunze, T. Korn, C. Pels, G. Meier, U. Merkt, J. Bäckström, M. Rübhausen. Applied Physics Letters **83**, 4509, **2003**
3. A.V. Sokolov. Optical Properties of Metals. GIFML, M (**1961**). 464 pp.
4. Lyaschenko S., Maximova O., Shevtsov D., Varnakov S., Tarasov I., Wiedwald U., Rosen J., Ovchinnikov S., Farle M. Journal of Magnetism and Magnetic Materials., **528**, 167803, **2021**
5. Maximova O., Ovchinnikov S., Lyaschenko S. IOP Publishing, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, **54**, 295201, **2021**

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТОВ ЗАМЕЩЕНИЯ НА АДСОРБЦИОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОК**

Мамонова М. В., Макаричева А. С.

*Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского*  
[matonovamv@omsu.ru](mailto:matonovamv@omsu.ru)

В работе исследовалось влияние заместительной адсорбции на энергетические и магнитные характеристики монослойной ферромагнитной плёнки железа на поверхности серебра.

Заместительная адсорбция характеризуется тем, что адсорбированные атомы металла могут выталкивать приповерхностные атомы субстрата в пленку и занимать их место. В первом приповерхностном слое подложки и в пленке образуется смесь атомов субстрата и адсорбата, которая по своим свойствам напоминает бинарный раствор двух металлов. Исследования проводились с применением двух подходов функционала спиновой плотности: вариационного метода [1] с учётом температурных эффектов и неоднородного распределения намагниченности и первопринципного, реализованного с помощью программного комплекса VASP [2]. Проводились расчеты полной и межфазной энергии, магнитного момента и энергии адсорбции системы Fe/Ag в зависимости от ориентации грани подложки, параметра покрытия  $\Theta$  и доли адатомов в пленке  $p$ .

Результаты расчета энергии адсорбции и равновесной доли адатомов  $p_{\min}$  вариационным методом показали, что энергия адсорбции растёт с увеличением температуры и параметра покрытия. Наименьшие по модулю значения энергии адсорбции принимает для плотноупакованной грани подложки (111), что обусловлено более сильной связью между атомами на поверхности. Для всех граней доля адатомов в пленке  $p_{\min} < 0.5$ , что соответствует сильному перемешиванию, а при температурах  $T < 600\text{K}$  и параметре покрытия  $\theta > 0.8$  наблюдается образование структуры типа «сэндвич» ( $p_{\min} = 0$ ).

Чтобы проверить полученные выводы другим методом, были проведены расчеты с помощью программного комплекса VASP. Применялся метод присоединенных плоских волн (PAW) с псевдопотенциалом в приближении GGA PBE. Магнитный момент атомов направлен коллинеарно вдоль оси  $z$ . Система состояла из семи слоев, по четыре атома в слое. Проводилась полная релаксация с учетом сходимости расчетов по энергии порядка  $10^{-5}\text{эВ}$ . Были сделаны следующие выводы: наиболее энергетически выгодным положением адатомов как для пленки, так и для «сэндвич» структуры является положение адатомов в междоузлии; полная энергия для ориентаций поверхности (100) и (111) минимальна для доли адатомов на поверхности  $p=0$  (структура типа «сэндвич»), а максимальна для  $p=1$  (непрерывная пленка). Для грани (110) минимум наблюдается при  $p=0.5$  (равномерное перемешивание). А положительные значения энергии адсорбции для непрерывной пленки демонстрируют невозможность ее образования. Таким образом первопринципные

расчеты качественно подтверждают выводы, сделанные при расчетах вариационным методом при  $T=0$  и  $\theta=1$ .

Результаты расчетов для различных вариантов положения замещающих атомов, для доли адатомов  $p=0,25$  и  $p=0,75$  показали, что смена позиций в ячейке замещающих атомов не влияет на энергетические и магнитные характеристики. Для  $p=0,5$  есть два случая замещения: послойное и в шахматном порядке. Для ориентаций поверхности (100) и (111) более энергетически выгодно шахматное замещение, а для грани (110) послойное.

Таким образом, в работе выявлено сильное влияние перемешивания в системе Fe/Ag как на магнитные, так и на энергетические характеристики системы. Результаты расчетов в рамках двух подходов показали, что при низких температурах энергетически более выгодно образования «сэндвич» структуры, а непрерывная пленка образовываться не будет, что согласуется с данными эксперимента [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

## Литература

1. S.P. Klimov, M.V. Mamonova, V.V. Prudnikov, Solid State Phenomena, **190**, **2012**
2. P.G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B, **54**, 11169, **1996**
3. A. Hahlin, C. Andersson, J. Hunter Dunn, B. Sanyal, O. Karis and D. Arvanitis, Phys. Rev, B, **73**, 134423, **2006**

# СИНТЕЗ В СВЧ ПЛАЗМЕ АЛМАЗНЫХ ПЛЁНОК С ВНЕДРЁННЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ YAG:Ce, ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЙ МОЩНОСТИ.

Мартьянов А.К.<sup>1</sup>, Седов В.С.<sup>1</sup>, Кузнецов С.В.<sup>1</sup>,  
<sup>1</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН  
*martyanov@nsc.gpi.ru*

Разработка новых высокоинтенсивных рентгеновских лазеров на свободных электронах (XFEL) поставила задачу синтеза прочных сцинтилляционных материалов для визуализации жёсткого рентгеновского излучения. К визуализаторам предъявляются строгие требования из-за интенсивного энергетического воздействия, которое приводит к их быстрому разрушению [1]. Алмаз - уникальный материал, способный выдерживать высокие дозы радиации и тепловые нагрузки. Церий обладает интенсивной рентгенолюминесценцией в видимом диапазоне с наносекундным временем затухания [2,3]. Композит алмаз-YAG:Ce уже показал рентгенолюминесценцию  $\text{Ce}^{3+}$  с наносекундным временем затухания, но содержание церия в твердом растворе YAG:Ce не было оптимизировано [4].

В данной работе были получены наночастицы с оптимизированным составом, внедрены в матрицу поликристаллического алмаза с образованием композитного материала алмаз-YAG:Ce. Получение композита производилось в три этапа. Полированные монокристаллические кремниевые пластины, используемые в качестве подложек, засеивались детонационными наноалмазами со средним размером частиц 5 нм из суспензии на водной основе. Затем химическим осаждением из метан-водородной СВЧ плазмы в реакторе ARDIS 100 (2,45 ГГц) выращивалась первичная микрокристаллическая алмазная плёнка толщиной 2 мкм. На втором этапе сформировавшаяся алмазная плёнка засеивалась наночастицами YAG:Ce из водной суспензии с использованием центрифуги. На третьем этапе образцы повторно заращивались алмазом до полной интеграции наночастиц (рис. 1).

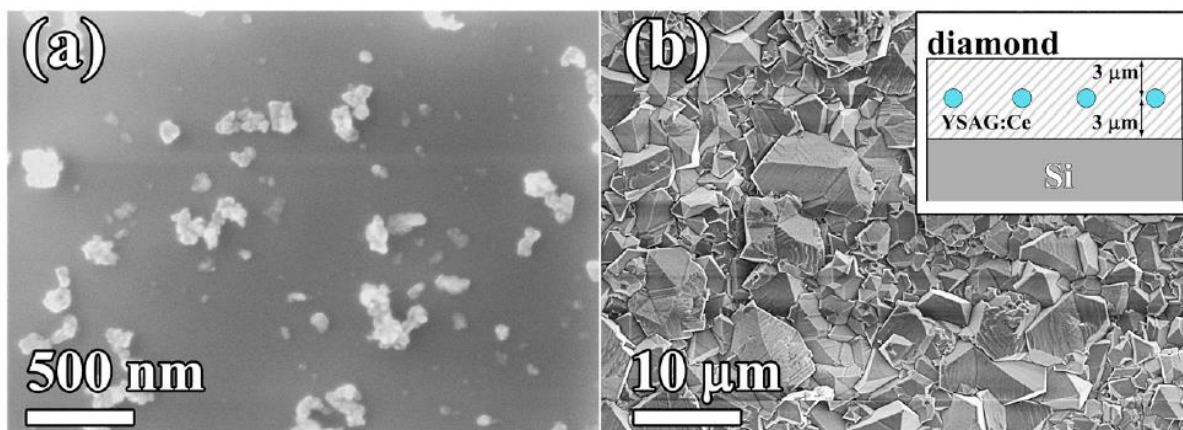


Рис. 1. Изображения РЭМ: агломераты наночастиц YAG:Ce на подложке Si (a) и поверхность (b) поликристаллической алмазной пленки с внедренными частицами YAG:Ce. На вставке поперечное сечение композита (схематично).

Таким образом, создан алмазный композит с регулируемым химическим составом встроенных люминесцентных наночастиц. Такой класс композитов представляет собой инструмент для разработки новых материалов с желаемыми свойствами для широкого круга применений, включая обнаружение и визуализацию интенсивного рентгеновского излучения.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 20-32-70074).

#### Литература

1. T. Pikuz et al. *Sci. Rep.*, **5**, 17713, **2015**
2. S. Witkiewicz-Lukaszek et al. *Cryst. Growth Des.*, **18**, 1834–1842, **2018**
3. A. Khan et al. *J. Alloys Compd.*, **741**, 878–882, **2018**
4. V. Sedov et al. *Carbon*, **174**, 52–58, **2021**

# ВЛИЯНИЕ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И ТЕМПЕРАТУР НА ФОРМИРОВАНИЕ НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ В СПЛАВАХ $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$ , $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ , $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Gd}_4\text{Tb}_2\text{Er}_2$

Меньшикова С. Г.<sup>1,2</sup>, Бражкин В. В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>УдмФИЦ УрО РАН, <sup>2</sup>УдГУ, г.Ижевск, <sup>3</sup>ИФВД РАН, г.Москва  
*svetlmensh@mail.ru*

Сочетание различных экстремальных воздействий (высокие и сверхвысокие давления, кручение под давлением и равноканальное угловое прессование, сверхнизкие и сверхвысокие температуры, сильные электрические и магнитные поля, быстрое и сверхбыстрое охлаждение из расплава) позволяет существенно расширить области метастабильных состояний и получать материалы с различной структурной иерархией: аморфной, квази- и нанокристаллической и, соответственно, с разными свойствами.

В работе методами рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии исследованы структура, элементный и фазовый состав заэвтектических сплавов  $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$ ,  $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ ,  $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Gd}_4\text{Tb}_2\text{Er}_2$  (ат.%), полученных при затвердевании расплавов со скоростью 1000 град/с под высоким давлением 3, 5 и 7 ГПа. Температура закалки расплавов 1500-1700°C. Образцы для исследований получали в камере высокого давления типа «тороид». Нагрев и плавление сплавов проводили пропуском переменного тока через образец.

Структура всех полученных образцов однородная, плотная, без усадочных раковин. Затвердевание расплава под давлением 3, 5 и 7 ГПа приводит к изменению фазового состава сплавов. При давлении 7 ГПа получены новые кристаллические фазы. Средняя микротвердость образцов, полученных под давлением, в 3-4 раза выше (в зависимости от состава и высокого давления) микротвердости исходных образцов за счет твердорастворного и дисперсионного упрочнения.

Метод сочетания высоких давлений, температур и скоростей охлаждения остается перспективным для модификации и изменения уровня свойств, а также получения новых соединений в сплавах на основе алюминия с переходными и редкоземельными металлами.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ (Проект № 121030100001-3). Электронно-микроскопические исследования выполнены в ЦКП «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН, г.Ижевск.

## ВЯЗКОСТЬ, ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА И СВЕРХБЫСТРОЕ ЗАТВЕРДЕВАНИЕ РАСПЛАВОВ Al-Cu (ДО 30 ат.% Cu)

Меньшикова С. Г.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>УдмФИЦ УрО РАН, <sup>2</sup>УдГУ, г.Ижевск

*svetlmenh@mail.ru*

Сплавы на основе системы Al-Cu востребованы в различных производственных сферах, т.к. обладают относительно небольшим весом, высокой прочностью, низким коэффициентом трения, хорошими пластическими свойствами, однородной плотностью, имеют хорошую прочность и жаростойкость.

Многие технологические процессы получения материалов проходят через жидкую фазу. Сложный характер взаимодействия атомов в твердой фазе в системе Al-Cu приводит к тому, что в жидкости возникают микронеоднородности концентрационного и топологического (структурного) типов.

В работе сведения о структуре жидких сплавов  $Al_{100-x}Cu_x$  ( $x=0, 2, 4...28$  ат.%) получены прямыми (синхротронные исследования) и косвенными (исследования вязкости) методами, а также в результате моделирования расплавов. Температурный диапазон исследований от ликвидуса сплавов до  $1300^{\circ}C$ . Проведены электронно-микроскопические и дюраметрические сравнительные исследования структуры и микротвердости сплавов Al-Cu, формирующихся в результате сверхбыстрого охлаждения расплавов (метод спиннингования) после различных перегревов над ликвидусом.

Моделирование расплавов в жидком и переохлажденном состояниях выполнено с помощью потенциала погруженного атома методом классической молекулярной динамики. Проведен анализ термодинамических и структурных свойств системы. Обнаружены особенности концентрационных зависимостей плотности, энтальпии смешения, параметров Вендта-Абрахама и трансляционного порядка, коэффициента Уоррена-Каули расплавов. Результаты синхротронных исследований коррелируют с результатами модельных расчетов.

Вязкость расплавов исследована методом затухающих крутильных колебаний цилиндрического тигля с расплавом. Исследования показали, что вязкость жидких сплавов при повышении температуры уменьшается. Значения, полученные в режимах нагрева и последующего охлаждения, совпадают во всем исследованном интервале температур. При дальнейшем анализе, на зависимостях

логарифма вязкости от обратной температуры обнаружен излом вблизи температуры 1043 К, условно разделяющий состояние расплавов на низко- и высокотемпературное. Значения вязкости, энергия активации вязкого течения с увеличением содержания меди в расплаве увеличиваются как до, так и после излома.

Структура всех быстрозакаленных сплавов мелкокристаллическая. В доэвтектических сплавах основная структурная составляющая - твердый раствор Al(Cu), эвтектика ( $\alpha$ Al+Al<sub>2</sub>Cu) располагается по границам зерен фазы Al(Cu). Расплавы кристаллизуются по метастабильной диаграмме, расширяющей область алюминиевых твердых растворов. С увеличением концентрации меди, независимо от температуры расплава, образуется более пересыщенный твердый раствор Al(Cu). При низкой температуре закалки 1023 К зерна фазы Al(Cu) имеют дендритное строение. Повышение температуры до 1473 К, с последующей остановкой на 1023 К, подавляет дендритную кристаллизацию, и приводит к формированию субмикроскопической зеренной структуры. В заэвтектических сплавах основной структурной составляющей являются алюминиды Al<sub>2</sub>Cu. При тех же условиях (температуры закалки 1473 и 1023 К) формируется зеренная дендритная структура, состоящая из более мелких субзерен. Перегрев расплава выше температуры ~ 1043 К влияет на механические характеристики сплавов. Изменения морфологии, размера и количества структурных составляющих в сплавах, полученных при разных температурных обработках расплава, коррелируют со средними значениями микротвердости сплавов.

Результаты моделирования расплавов, выполненные в работе, коррелируют с результатами эксперимента. Кинетика структурообразования при фазовом переходе из жидкого в твердое состояние и обратно определяется концентрационной неоднородностью расплава, которая регулируется температурными условиями эксперимента.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ (Проект № 121030100001-3).

Электронно-микроскопические исследования выполнены в ЦКП «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН, г.Ижевск. Компьютерное моделирование выполнено с использованием ресурсов кластера «Уран» на базе ИММ УрО РАН, г.Екатеринбург



(<http://parallel.uran.ru>), автор благодарит д.ф.-м.н. Р.Е. Рыльцева за помощь в выполнении работы. Автор благодарит А.Ю. Корепанова за помощь в измерении вязкости расплавов. Синхротронные исследования выполнены на ускорительном комплексе Spring-8, Япония, автор благодарит К. Ohara за помощь в исследовании.

## SECOND HARMONICS OF MAGNETIC QUANTUM OSCILLATIONS IN LAYERED METALS

Mogilyuk T. I.<sup>1</sup>, Grigoriev P. D.<sup>2,3,4</sup>

<sup>1</sup>*NRC Kurchatov Institute, Russia, 123098, Moscow, Ploshchad'  
Akademika Kurchatova st., 1*

<sup>2</sup>*Landau Institute for Theoretical Physics, Russia, 142432, Moscow  
Region, Chernogolovka, Akademika Semenova av., 1A*

<sup>3</sup>*National University of Science and Technology MISiS, Moscow, 101000  
Russia*

<sup>4</sup>*Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow,  
119333 Russia  
5taras@mail.ru*

We find expressions for the second harmonics of magnetic quantum oscillations of interlayer magnetoconductivity and magnetization in quasi-two-dimensional metals. The expressions obtained are useful, since in some experiments with quasi-two-dimensional metals, the second harmonic of magnetic quantum oscillations is also observed. We analyze the effect of magnetic oscillations of the real part of electron self-energy part  $\text{Re}\Sigma$  on the shape of the quantum magnetization oscillations and on the magnetoresistance of quasi-two-dimensional conductors. In the limit of strong quantum oscillations, which is possible only in two-dimensional or quasi-two-dimensional metals, the real part of electron self-energy function  $\text{Re}\Sigma$  also oscillates strongly. Usually it is neglected, taking into account only its imaginary part  $\text{Im}\Sigma$ , since it is assumed that  $\text{Re}\Sigma$  only shifts the chemical potential and does not affect the observed properties. However,  $\text{Re}\Sigma$  cannot be neglected if it also oscillates. As our calculations show,  $\text{Re}\Sigma$  oscillations affect the observed properties, since they shift the chemical

potential relative to the Landau level even on average over the period of quantum oscillations.

Oscillations of  $\text{Re}\Sigma$  affect the shape of the quantum magnetization oscillations [1,2], which is used to experimentally determine the regime of quantum oscillations: constant chemical potential or a constant electron density [3,4]. Also, these oscillations change the monotonic part in a strong field by a coefficient of the order of 2 [5,6], the angular dependence and the shape of the quantum oscillations of the magnetoresistance [7,8]. Therefore, despite attempts in organic metals to achieve a constant electron density regime, the shape of the magnetization oscillations remained consistent with the constant chemical potential [3,4]. This question is not only of great practical importance for the analysis of numerous experiments, but also of substantial interest for the development of the theory of magnetic quantum oscillations.

T. I. M. acknowledges the RFBR grants 19-02-01000, 21-52-12027.

## Литература

1. P. D. Grigoriev, JETP **92**, 1090, **2001**
2. T. Champel and V. P. Mineev, Phys. Rev. B **66**, 195111, **2002**
3. J. Wosnitza, Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals and Superconductors, (Springer-Verlag, Berlin, **1996**)
4. S. A. J. Wieggers, M. Specht, L. P. Lévy, M. Y. Simmons, D. A. Ritchie, A. Cavanna, B. Etienne, G. Martinez, and P. Wyder, Phys. Rev. Lett. **79**, 3238, **1997**
5. A. D. Grigoriev, P. D. Grigoriev, Low Temp. Phys., **40**, 367, **2014**
6. P. D. Grigoriev, T. I. Mogilyuk, Phys. Rev. B, **90**, 115138, **2014**
7. P. D. Grigoriev, T. I. Mogilyuk, Phys. Rev. B, **95**, 195130, **2017**
8. P. D. Grigoriev, T. I. Mogilyuk, J. Phys.: Conf. Ser., **1038**, 012123, **2018**

## ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ АКТИВНЫХ СИСТЕМ В УСЛОВИЯХ ДИНАМИКИ ЛАНЖЕВЕНА

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

*МГТУ им. Н.Э. Баумана*

*kruchkov\_nkt@mail.ru*

Системы самодвижущихся частиц, как биологического [1-2], так и искусственного происхождения [3-6], способны демонстрировать широкий спектр неравновесных явлений. Одним из таких явлений является фазовое расслоение, вызванное активностью, (MIPS, motility induced phase separation) [7-9] суть которого состоит в возможности расслоения системы активных частиц на области низкой и высокой плотности даже в отсутствие притягивающего взаимодействия. В литературе активно исследовалось это явление на примере систем в условиях передемпфированной Броуновской динамики, основному внимание уделялось расчету фазовых диаграмм и их теоретическому описанию.

В настоящей работе исследовался сценарий возникновения MIPS в плотной двумерной системе активных частиц с Ланжевеновским типом динамики и с чисто отталкивающими парными взаимодействиями. Установлено, что по мере увеличения активности частиц система проходит несколько стадий с различными типами динамики. Наиболее отчетливо это видно на зависимости производной средней кинетической энергии частиц по активности, пример которой представлен на Рис.1. На зависимости  $dK(A)/dA$  можно выделить несколько участков: (i)  $5 < A < 11$  в системе формируется устойчивое расслоение на плотную и газообразную фазу, плотная фаза ведет себя преимущественно стационарным образом; (ii)  $11 < A < 23$  система представляет собой сосуществование конденсированной (плотной) и газообразной фазы, однако, достаточно большие области конденсированной фазы могут спонтанно терять стабильность и разрушаться, что объясняет скачек в росте  $dK(A)/dA$ ; (3)  $23 < A$  конденсированные кластеры становятся короткоживущими.

Полученные результаты раскрывают ранее неизвестные особенности формирования фазового расслоения, обусловленного активностью, в двумерных системах активных частиц с чисто отталкивающим типом взаимодействий и в условиях Ланжевеновского типа динамики.

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

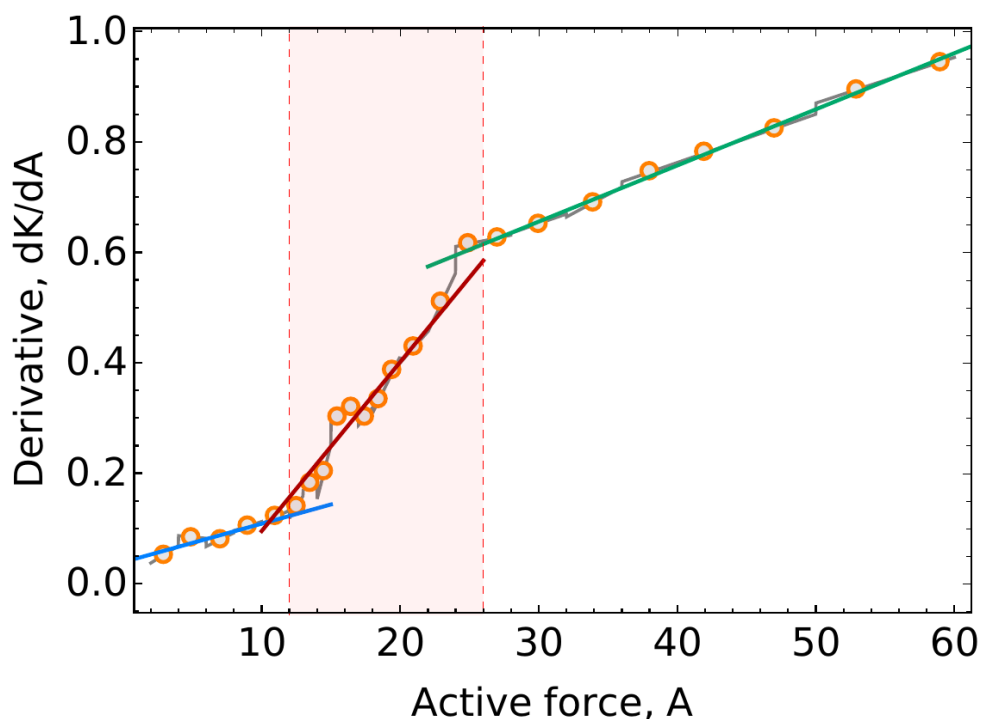


Рис.1 Зависимость производной средней кинетической энергии по активности от активности.

#### 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. S. Mandalet et al., *Phys. Rev. Lett.* **123**, 228001, **2019**
8. P. Digregorio et al., *Phys. Rev. Lett.* **121**, 098003, **2018**
9. L. Caprini et al., *Phys. Rev. Lett.* **124**, 078001, **2020**

## КОЛЛЕКТИВНЫЕ ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ В КРИСТАЛЛАХ. ВКЛАД ДЕФЕКТОВ И АНГАРМОНИЗМА РЕШЁТКИ

Норман Г. Э.<sup>1)</sup>, Негодин В. Д.<sup>2)</sup>, Флейта Д. Ю.<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>НИУ ВШЭ, <sup>2)</sup>МФТИ (НИУ)

*gnorman@hse.ru*

Исследован характер коллективных движений атомов в кристаллах. Использован метод молекулярной динамики. Основной измеряемой величиной взят четырёхточечный корреляционный коэффициент  $CC$ , предложенный ранее для обнаружения и измерения коллективных движений в различных фазовых состояниях и в окрестностях точек фазовых переходов первого рода [1, 2]. Коэффициент  $CC$  равен среднему значению косинуса угла  $\varphi$  между перемещениями двух атомов за выбранное время и имеет смысл меры согласованности движения соседних атомов: (а) один предельный случай  $CC = 1$ , когда оба атома двигаются скоррелированно, т.е. все углы  $\varphi = 0$ , (б) другой предельный случай  $CC = 0$ , когда корреляции отсутствуют, (в) отрицательные значения говорят о противокорреляции. Проведены расчёты гистограмм распределений по парциальным значениям  $CC_\varphi$ . Рассмотрены примеры кристаллов Леннарда-Джонса, титана и меди. Получены следующие результаты, справедливые при температурах выше дебаевской.

1. Выделена фононная составляющая коллективных движений атомов в кристаллах. Эта составляющая не зависит от температуры системы и сильно анизотропна – имеет пик на значении парциального корреляционного коэффициента  $CC_\varphi = 1$ .

2. Вторая составляющая коллективных движений связана с дефектами и ангармонизмом кристаллической структуры. Эта составляющая ближе к изотропной, чем фононная, и имеет характер возмущений относительно чисто фононной составляющей, гипотетически достижимой при нулевой температуре в классическом приближении.

3. Температурная зависимость гистограмм второй составляющей имеет больцмановский вид в аррениусовых координатах. Это может указывать на самосогласованность выделения второй составляющей. Энергия возбуждений оказалась практически одинаковой для всех парциальных значений корреляционного коэффициента и приблизительно равна  $0.5\varepsilon$ .

4. Вклад второй составляющей коллективных движений атомов в кристаллах, её гистограмма, значительно ниже распределения значений коррелятора в жидкости.

5. Проведено сравнение значений СС для кристалла и расплава в области температур, где для одной и той же температуры возможны состояния как кристалла, так и расплава, одно из которых – равновесное, а другое – метастабильное. Показано, что значения СС для кристалла превышают значения для расплава более, чем на порядок величины. Таким образом, значения СС обнаруживают сильный гистерезис при перегреве, плавлении и последующем охлаждении. Процесс рассмотрен в изохорном режиме [3].

6. При расчёте СС при нагреве кристалла обнаружено монотонное увеличение значений СС с ростом температуры, т.е. с увеличением числа дефектов и роли ангармонизма. Рост останавливается и сменяется резким спадом при подходе к точке спиnodального распада, в узкой области перед этой точкой, когда число дефектов и ангармонизм возрастают настолько, что подавляются акустические колебания.

7. Эффект повышения коллективности и согласованности движений атомов в кристаллах с ростом числа дефектов показался нам неожиданным. Поэтому были проведены дополнительные расчёты для другой модели: плоского слоя с открытыми границами, т.е. в изобарном режиме при нулевом давлении. Известно, что число дефектов растёт с приближением к поверхности. Расчёт СС показал, что значения корреляционного коэффициента СС также увеличиваются при приближении к поверхности.

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

#### Литература

1. Г. Э. Норман, В. В. Писарев, Д. Ю. Флейта, Письма в ЖЭТФ, **109**, 689, **2019**
2. V. Negodin, Y. Polyachenko, D. Fleita, V. Pisarev, G. Norman, J. Mol. Liquids, **322**, 114954, **2021**
3. Г. Э. Норман, Д. Ю. Флейта, Письма в ЖЭТФ, **111**, 251, **2020**

## ЗАГАДКА ДЫРОЧНОГО КАРМАНА ВБЛИЗИ ЦЕНТРА ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ МОНОСЛЕ FeSe

Павлов Н. С.<sup>1</sup>, Некрасов И. А.<sup>1</sup>, Бухвалов Д.В.<sup>2,3</sup>

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

<sup>2</sup>*Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина,  
Екатеринбург, Россия*

<sup>3</sup>*Nanjing Forestry University, Nanjing, China  
pavlovns@gmail.com*

Одним из классов сверхпроводящих систем являются соединения, где сверхпроводимость реализуется в плоскостях FeAs [1] или FeSe [2]. Среди них выделяется система монослой FeSe, выращенный на подложке SrTiO<sub>3</sub> (FeSe/STO), поскольку переход в сверхпроводящее состояние происходит при достаточно высокой критической температуре  $T_c$  65-75 К [3]. Тогда как в объёмном образце FeSe переход происходит при 8 К. На данный момент считается, что такая высокая критическая температура FeSe/STO обеспечивается электрон-фононным механизмом [4,5]. В тоже время остаётся вопрос объяснения электронной структуры FeSe/STO, полученной в фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES), с помощью первопринципных теоретических подходов.

Экспериментально в FeSe/STO отсутствуют дырочные листы поверхности Ферми около  $\Gamma$  точки и наблюдаются «мелкая» и «двойниковая» зоны ~50 мэВ и ~150 мэВ около M точки зоны Бриллюэна [5]. В большинстве случаев теоретические расчёты воспроизводят зонную структуру в области M точки, однако в них присутствуют зоны вблизи  $\Gamma$  точки (см. например DFT [6,7] и LDA+DMFT [8,9]). На данный момент теоретически не найдено за счёт чего в центре зоны Бриллюэна отсутствуют поверхности Ферми в FeSe/STO.

В нашей работе рассмотрена возможность атомов Fe и Se к смещению от идеального положения, не только в плоскости  $xy$ , но и по оси  $z$ . В предыдущих работах возможность смещения атомов Fe по оси  $z$  не рассматривалась. Как было показано в сканирующей туннельной микроскопии (STM) [10] в плоскости  $xy$  искажения в положении FeSe от идеальной структуры колеблются на 15%, а по оси  $z$  разброс расстояний от 0 до 1.1 Å. В DFT расчётах была оптимизирована по положению атомов большая суперячейка

монослоя FeSe. В результате получены различные варианты искажений внутри ячейки. При использовании сжатого или растянутого положения атомов для задания элементарной ячейки получено отсутствие дырочной поверхности Ферми в центре зоны Бриллюэна и близкая зонная структура около М точки. Причём к такой зонной картине приводит как сжатие элементарной ячейки в плоскости  $xy$ , так и её растяжение в плоскости  $xy$  при одновременном смещении атомов Fe по оси  $z$  из плоскости от их идеального расположения.

## Литература

1. М. В. Садовский, УФН, **178**, 1243, **2008**
2. М. В. Садовский, УФН, **186**, 1035, **2016**
3. Q.-Y. Wang, et al., Chin. Phys. Lett., **29**, 037402, **2012**
4. L. Rademaker, Y. Wang, T. Berlijn, and S. Johnston, New J. Phys. **18**, 022001, **2016**
5. J.J. Lee, et al., Nature **515**, 245, **2014**
6. M.X. Chen, Z. Ge, Y.Y. Li, D.F. Agterberg, L. Li, and M. Weinert, Phys. Rev. B **94**, 245139, **2016**
7. L.V. Tikhonova, M.M. Korshunov, J. Supercond. Nov. Magn. **33**, 171 **2020**
8. S. Mandal, P. Zhang, S. Ismail-Beigi, and K. Haule, Phys. Rev. Lett., **119**, 067004, **2017**
9. И.А. Некрасов, Н.С. Павлов, М.В. Садовский, ЖЭТФ, **153**, 590, **2018**
10. G. Zhou, et al., Appl. Phys. Lett. **108**, 202603, **2016**



# ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ ЭФФЕКТ БЛИЗОСТИ В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ СВЕРХПРОВОДНИК - ФЕРРОМАГНЕТИК

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

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

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

*\*alputilov@mail.ru*

Эффект близости и обратный эффект близости, связанные с проникновением куперовских пар через интерфейс между сверхпроводником (S) и ферромагнетиком (F), приводят к интересным термодинамическим и транспортным явлениям в S/F системах. Недавно был предсказан новый механизм обратного эффекта близости, приводящий к возбуждению дальнедействующих спонтанных сверхпроводящих токов и магнитных полей внутри S слоя на масштабах порядка лондоновской глубины  $\lambda$  от S/F границы (т. н. электромагнитный эффект близости) [1]. Было показано [1], что отношение спонтанного магнитного поля в S слое и поля намагниченности внутри F слоя является малым и определяется квадратом отношения сверхпроводящей корреляционной длины в F слое и лондоновской длины. В данной работе показано, что данное отношение может быть увеличено вплоть до значений порядка единицы в сверхрешетках  $[S/F]_n$  с чередующимися S и F слоями. Для расчета распределения сверхпроводящих мейсснеровских токов и спонтанных магнитных полей в сверхрешетках  $[S/F]_n$  используется уравнение Лондонов на векторный потенциал  $\mathbf{A}$ , при этом  $\lambda$  - периодическая функция координаты  $x$  поперек слоев:

$$\text{rot rot } \mathbf{A} + \lambda^{-2}(x)\mathbf{A} = 4\pi \text{ rot } \mathbf{M}$$

Предполагалось, что период сверхрешетки  $d \ll \lambda$ , а намагниченность F слоев однородна, направлена в плоскости слоев и равна  $M_0$ .

Показано, что для достаточно большой структуры (толщина которой существенно превосходят  $\lambda$ ) вдали от ее краев среднее магнитное поле отсутствует: поле намагниченности F слоев, в среднем, полностью компенсируется полем, индуцированным текущим вдоль поверхности структуры мейсснеровским током. Магнитное поле в S слое при этом составляет величину  $B = -4\pi M_0 d_f/d$ , а в F слое  $B = 4\pi M_0 d_s/d$ . Здесь  $d_s$  и  $d_f$  – толщины S и F слоев, а  $d = d_s + d_f$ .

Вблизи границы структуры, параллельной плоскости слоев, масштаб спада спонтанных токов составляет  $\lambda_0 = \langle \lambda^{-2} \rangle^{-1/2}$ , а вблизи

границы, перпендикулярной плоскости слоев и параллельной намагниченности, масштаб спада составляет  $\langle \lambda^2 \rangle^{1/2}$ .

Для расчета распределения магнитного поля и токов в структуре с конечным числом периодов был использован подход, основанный на матричной связи между величинами  $(A_n, B_n)$  и  $(A_{n+1}, B_{n+1})$  при смещении на период структуры перпендикулярно плоскости слоев. Граничные условия определяются равенством магнитного поля на внешних границах сверхрешетки внешнему полю (которое предполагалось равным нулю). При расчете предполагалось, что в сверхпроводнике  $\lambda = \lambda_s = 120$  nm, а в ферромагнетике профиль  $\lambda(x)$  находился в рамках теории Узаделя. Полученное распределение  $\lambda(x)$  изображено на вставке рис. 1b, оно соответствует  $\lambda_0 = 126$  nm.

На рис. 1a показан результат расчета магнитного поля в структуре, состоящей из  $N=24$  периода. Получено, что вдали от краев магнитное поле приближается к значениям, соответствующим безграничной структуре (указаны пунктиром). Также был выполнен расчет распределения магнитного поля в многослойной структуре ( $N=12$ ), находящейся в контакте с толстым сверхпроводником толщиной  $D=300$  nm (рис. 1b). Показано, что на границе толстого сверхпроводника магнитное поле составляет  $B = -4\pi M_0 d_f \lambda_0 / d(\lambda_0 + \lambda_s)$ , что существенно превышает величину спонтанного поля в S/F бислоях [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20-12-00053).

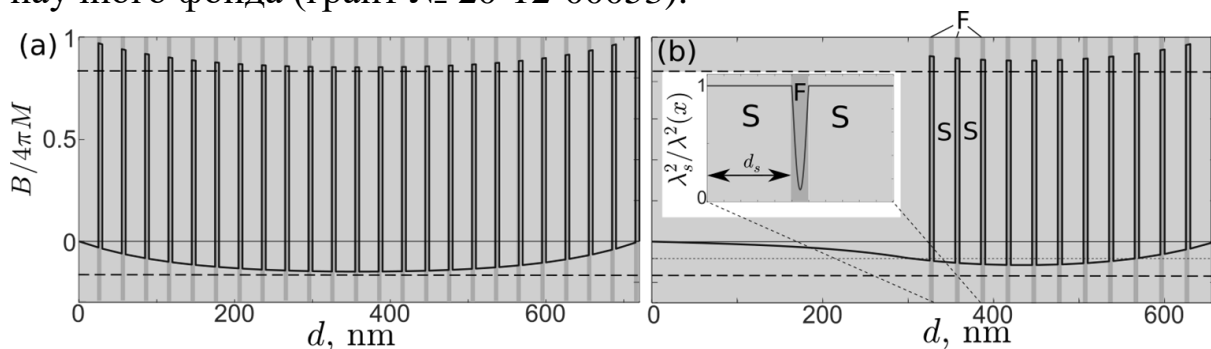


Рис. 1. Распределение магнитного поля в многослойной структуре,  $d_s=25$  nm,  $d_f=5$  nm. (a) Структура, состоящая из  $N=24$  периодов, ограничена вакуумом. (b) Структура состоит из  $N=12$  периодов, граничит с толстым сверхпроводником ( $D=300$ nm).

Литература.

1. S. V. Mironov, A. S. Mel'nikov, and A. I. Buzdin, Appl. Phys. Lett. **113**, 022601 (2018)

## ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ СПИНОВЫХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКИ ШВИНГЕРА-КЕЛДЫША НА ОСНОВЕ ПОДХОДА ПОПОВА-ФЕДОТОВА

Ремизов С.В.<sup>1,2,3</sup>, Елистратов А.А.<sup>1</sup>

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

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

<sup>3</sup>*Национальный исследовательский университет «Высшая школа  
экономики» (НИУ ВШЭ), 109028 Москва, Россия  
sremizov@gmail.com*

Сложность описания спиновых систем во многом связана с неабелевой природой спиновых операторов. Ранее нами было предложено [1] дальнейшее развитие одного из методов, позволяющих преодолеть эту трудность и основывающегося на формализме Попова-Федотова [2]. Этот подход базируется на двух основных идеях: во-первых, спиновые операторы заменяются двумя фермионными для реализации правильных коммутационных соотношений. Во-вторых, для компенсации вклада в статсумму из-за увеличения размерности фоковского базиса формально вводится мнимый электрохимический потенциал. Такая компенсация необходима для получения правильных величин для средних значений спиновых операторов благодаря коррекции нормировки средних. Еще одним важным шагом в развитии этого подхода был сделан Киселевым и Опперманном, который заключался в применении формализма Швингера-Келдыша к спиновой системе, описываемой в рамках подхода Попова-Федотова [3].

Важно отметить, что мнимая величина химического потенциала приводит к тому, что функция распределения формально становится комплексной. Это представляет серьезную сложность при полноценном построении диаграммной техники, т.к. попытка «наивного» построения немедленно приводит к нарушению аналитических свойств функций Грина. Отмеченная сложность возникает при попытке выйти за рамки второго порядка теории возмущений по взаимодействию спина с окружением.

Нами предлагается способ, который позволяет преодолеть указанную трудность и построить теорию возмущений без нарушения

аналитических свойств функций Грина в произвольном порядке, что необходимо для вычисления сумм при «одевании» функций Грина.

В качестве тестовой и наиболее простой задачи для предлагаемого подхода мы рассмотрели спин-бозонную модель, описывающую взаимодействие спина с бозонным окружением. В рамках этого подхода выведено кинетическое уравнение для спина и явно показано выполнение флуктуационно-диссипационной теоремы.

В качестве еще одной задачи, в которой может быть применена предложенная методика была рассмотрена система невзаимодействующих непосредственно друг с другом кубитов, связанных с общей линией. В такой системе было вычислено эффективное взаимодействие между кубитами и вычислены корреляторы спин-спин.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ №20-37-70028.

## Литература

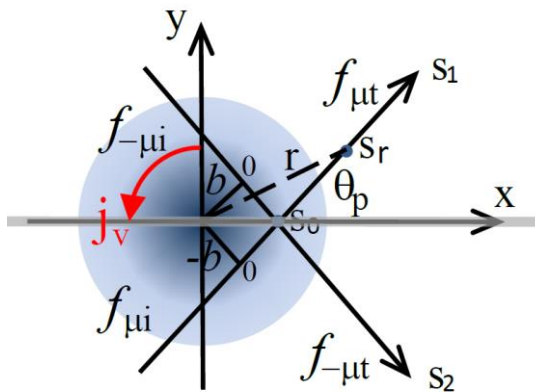
1. A.E. Elistratov, S.V. Remizov and Yu.E. Lozovik, Phys. Rev. A **102**, 042224 **2020**
2. V.N. Popov and S.A. Fedotov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **94**, 183 **1988**
3. M.N. Kiselev, H. Feldmann, R. Oppermann, Eur. Phys. J. B. **22**, 53 **2001**

# ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В ЭЛЕКТРОННОМ СПЕКТРЕ ПРИ ПЕРЕХОДЕ ОТ ВИХРЯ АБРИКОСОВА К ВИХРЮ ДЖОЗЕФСОНА

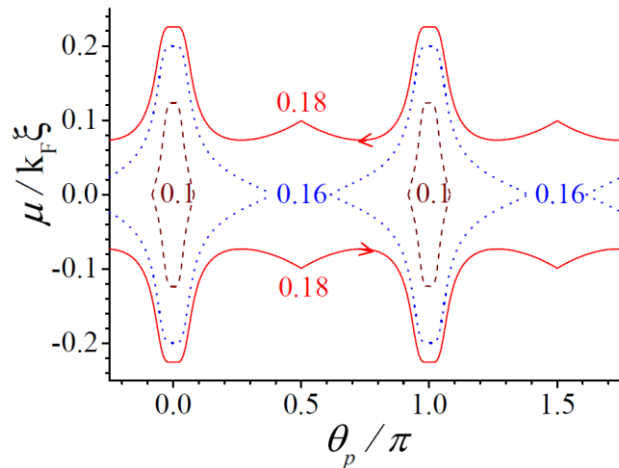
Самохвалов А. В., Пластовец В. Д., Мельников А. С.

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

В квазиклассическом приближении изучена трансформация спектра андреевских подщелевых состояний, локализованных в коре вихря Абрикосова, который находится на плоском дефекте с высокой прозрачностью барьера  $T=1/(1+Z^2) \leq 1$  (рис.1). Параметр  $Z=H/\hbar V_F$  характеризует отталкивающий потенциал для квазичастиц  $V(y)=H\delta(y)$  в плоскости дефекта. Нормальное зеркальное отражение квазичастиц от поверхности дефекта, обеспечивает связь волновых функций с противоположным значением углового момента  $\pm\mu$  и приводит к модификации вида подщелевого спектра квазичастиц  $E_n^2=(\Delta_0^3/E_F)(n+\beta)$ , который качественно отличается от спектра Кароли–де Жена–Матрикона [1]. Здесь  $\Delta_0$  – величина сверхпроводящей щели далеко от вихря,  $E_F$  – энергия Ферми,  $n$  – целое число, а  $\beta \sim 1$ . Присутствие дефекта в плоскости  $y=0$  нарушает изотропию спектра относительно направления квазиклассической траектории  $\theta_p$  и приводит к формированию минищели в спектре  $\Delta_m(\theta_p)$ .



**Рис. 1.** Квазиклассические траектории  $s_1$  и  $s_2$  с противоположным значением углового момента  $\mu=\pm k_F|b|$ . Планарный дефект расположен в плоскости  $y=0$ .



**Рис.2.** Вид орбит квазичастиц на плоскости  $(\mu, \theta_p)$  для трех значений энергии  $E/\Delta_0 = 0.1, 0.16, 0.18$ . Направление прецессии траектории вдоль орбиты показано стрелкой.

Минищель в спектре квазичастиц при  $Z \ll 1$  слабо зависит от угла  $\theta_p$  всюду, кроме узкого интервала углов в окрестности  $\theta_p = 0, \pi$ , где спектр  $E(b, \theta_p)$  оказывается практически бесщелевым в квазиклассическом приближении ( $b = -\mu/k_F$  – прицельный параметр траектории). Именно эти состояния дают основной вклад в локальную плотность состояний на уровне Ферми, что проявляется в формировании «мягкой» щели  $\Delta_{\text{Soft}} \sim Z\Delta_0$  в плотности состояний и в особенностях локальной дифференциальной проводимости (LDC)  $dI/dV$ . Результаты расчетов показали, что даже слабое ( $Z \ll 1$ ) нормальное рассеяние электронов и дырок на плоскости дефекта разрушает пик локальной плотности состояний при нулевом напряжении смещения  $V=0$  в центре вихря (zero-bias peak), вызывает азимутальную модуляцию LDC и формирование «мягкой» спектральной минищели  $\Delta_{\text{Soft}}$ , величина которой растет с увеличением силы барьера  $Z$ .

Нормальное рассеяние на дефекте качественно изменяет топологию изоэнергетических орбит на фазовой плоскости канонически сопряженных переменных  $\mu$  и  $\theta_p$ . В результате наряду с открытыми орбитами, которые соответствуют прецессии квазиклассической траектории на угол  $2\pi$  относительно центра вихря ( $x=y=0$ ), в окрестности углов  $\theta_p = 0, \pm\pi$  формируются замкнутые орбиты  $\mu(\theta_p)$ , для которых круговая прецессия траектории отсутствует. На рис.2 показан вид орбит для нескольких значений энергии квазичастиц. Этот топологический переход проявляется в специфическом поведении квантованных уровней квазичастиц (спектр в области низких энергий имеет корневую зависимость от номера уровня) и является отличительной чертой начала трансформации вихря Абрикосова в вихрь Джозефсона [2].

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

## Литература

1. C. Caroli, P.G. de Gennes, J. Matricon, Phys.Lett., **9**, 307, **1964**
2. A. V. Samokhvalov, V. D. Plastovets, and A. S. Mel'nikov, Phys. Rev. B, **102**, 174501, **2020**

## НОВЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ДИНАМИКИ САМОСБОРКИ В МЯГКОЙ МАТЕРИИ

Симкин И.В., Яковлев Е.В., Юрченко С.О.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана*

*vanyasimkin@gmail.com*

Актуальной областью физики мягкой материи является создание технологий синтеза новых материалов, повторяющих структуру биологических объектов – клеток [1], мембран [2], биосенсоров [3], адаптивных и искусственных биоморфных материалов на основе явления управляемой самоорганизации [4]. Для создания таких материалов потенциально могут быть использованы коллоидные эмульсии, состоящие из полидисперсных частиц. При помещении такой полидисперсной системы в управляющее внешнее вращающееся электрическое поле происходит сегрегация – большие и малые частицы сепарируются друг относительно друга.

Ввиду актуальности полидисперсных систем ставится следующая задача – исследовать процессы самосборки и самоорганизации, возникающих между полидисперсными микрочастицами в эмульсиях с регулируемым межчастичным взаимодействием.

Для решения этой задачи предложены методы анализа экспериментальных данных, основанных на постобработке. Реализован алгоритм по распознаванию частиц на кадре: определяются положения частиц, их размеры. После обнаружения частиц на кадре по среднему межчастичному расстоянию осуществляется идентификация фазового состояния частиц в системе [5].

Для кластеризации скоплений частиц в конденсированном состоянии применяется алгоритм DBSCAN [6]. Для анализа динамики самосборки разработан подход по отслеживанию эволюции числа частиц в кластерах со временем.

Предложенные методы будут использованы для определения оптимальных параметров самосборки (напряженность поля, полидисперсность системы), которые лягут в основу разработки новых методов создания биоморфных материалов.

Исследование выполнено при поддержке РФФ 17-19-01691. инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э. Баумана.

## Литература

1. Gonzato C. et al. J. Am. Chem. Soc., 136, 31, **2014**
2. Dong A. et al. Nature, 466, 7305, **2010**
3. Xing P. et al. Advanced Materials, 28, 34, **2016**.
4. Aida T. et al. Science, 335, 6070, **2012**
5. Ovcharov P. V. et al. J. Phys. Chem. C, 121, 48, **2017**
6. Ester M. et al. KDD 96, 34, **1996**

### НЕОДНОРОДНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ДОДЕКАБОРИДАХ $\text{Lu}_x\text{Zr}_{1-x}\text{B}_{12}$ СО СТРУКТУРНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ

Случанко Н.Е.

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

*Москва 119991, Россия*

*E-mail: nes@lt.gpi.ru*

Исследованы характеристики нормального и сверхпроводящего состояния (удельное сопротивление, коэффициент Холла, теплоемкость и намагниченность) модельных сильно коррелированных электронных систем  $\text{Lu}_x\text{Zr}_{1-x}\text{B}_{12}$  с кооперативной ян-теллеровской неустойчивостью жесткого ковалентного борного каркаса и динамическими зарядовыми страйпами. Показано, что эти металлы являются сверхпроводниками *s*-типа в грязном пределе с малой длиной свободного пробега носителей заряда  $l = 5 - 140 \text{ \AA}$ , в которых реализуется немонотонное изменение размера куперовской пары в диапазоне  $450 - 4000 \text{ \AA}$  [1]. Найдено, что додекабориды  $\text{ZrB}_{12}$  и  $\text{LuB}_{12}$  являются сверхпроводниками *I*-рода, замещение Zr на Lu вызывает переход к сверхпроводимости *II*-рода, при этом параметр Гинзбурга-Ландау-Маки немонотонно меняется в пределах  $0,65 \leq \kappa_{1,2} \leq 6$ . Приводятся аргументы в пользу двухщелевой сверхпроводимости в  $\text{Lu}_x\text{Zr}_{1-x}\text{B}_{12}$  со значениями щелей  $\Delta_1 \sim 14-18 \text{ K}$  и  $\Delta_2 \sim 6-8 \text{ K}$ , причем спаривание в верхней зоне соответствует условию сильной связи ( $\lambda_{e-ph} \sim 1$ ), тогда как в нижней зоне реализуется предел слабой связи ( $\lambda_{e-ph} \sim 0.1 - 0.4$ ).



В  $\text{Lu}_x\text{Zr}_{1-x}\text{B}_{12}$  выше  $T_c$  наблюдается псевдощель  $\Delta_{ps-gap} \sim 60-110$  К, величина которой определяется высотой барьера в двухъямном потенциале в окрестности тяжелого иона. Обсуждается также альтернативный сценарий анизотропной однозонной сверхпроводимости, в котором разрыв пары и анизотропия щели оказываются обусловленными динамическими зарядовыми страйпами. Анализируется происхождение уникальной поверхностной сверхпроводимости с характеристиками, превосходящими параметры, регистрируемые в объеме  $\text{ZrB}_{12}$  [1].

## Литература

1. Azarevich A., Bogach A., Glushkov V., Demishev S., Khoroshilov A., Krasikov K., Voronov V., Shitsevalova N., Filipov V., Gabáni S., Flachbart K., Kuznetsov A., Gavrilkin S., Mitsen K., Blundell S. J., Sluchanko N.E., Phys. Rev. B **103**, 104515, 2021

## ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭКСИТОНОВ В КОЛЛОИДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛАХ ПРИ ВЫСОКОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ЛАЗЕРНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ

Смирнов А. М.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1-2

<sup>2</sup> ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, 125009, Москва, Моховая 11-7  
[alsmir1988@mail.ru](mailto:alsmir1988@mail.ru)

При резонансном однофотонном стационарном возбуждении экситонных переходов в коллоидных нанопластинах  $\text{CdSe/CdS}$  лазерными импульсами обнаружено увеличение пропускания на длинах волн, соответствующих переходу носителей заряда из подзон тяжелых  $1hh$  и легких  $1lh$  дырок в зону проводимости  $1e$  (переход  $1hh-1e$  и  $1lh-1e$ , соответственно). При нерезонансном однофотонном возбуждении в область, выше края экситонного поглощения, обнаружено просветление на длине волны, соответствующей переходу носителей заряда из подзоны дырок, отщепленной за счет спин-орбитального взаимодействия, в зону проводимости  $1e$  (переход  $1so-1e$ ). С ростом интенсивности возбуждения увеличение

пропускания на длинах волн экситонных переходов, а также в более коротковолновой области, по сравнению с длиной волны возбуждения, объяснено эффектом заполнения фазового пространства экситонов, перекачкой энергии между состояниями и экситон-экситонным взаимодействием с образованием свободных носителей заряда и дальнейшей их каскадной релаксацией по экситонным состояниям [1]. Установлено, что при резонансном однофотонном возбуждении экситонных переходов в нанопластинах CdSe среднее время жизни экситонов составляет около 200 пс при комнатной температуре [2].

При нерезонансном однофотонном возбуждении в край области экситонного поглощения нанопластинок CdSe/CdS импульсами второй гармоники лазера (540 нм), работающего в режиме модуляции добротности, обнаружено увеличение пропускания на длине волны экситонного перехода  $1hh-1e$  (525 нм). Обнаруженная особенность экситонного поглощения объяснена эффектом заполнения фазового пространства при взаимодействии экситонов и фононов, приводящих к эффекту насыщения поглощения. Процесс межзонного поглощения фотона с энергией, меньшей чем энергия, соответствующая переходу носителей заряда из подзоны тяжелых дырок в зону проводимости, протекает с участием оптического продольного фонона [3]. Выявленное отсутствие просветления перехода  $1hh-1e$  при возбуждении в край области экситонного поглощения объяснено недостаточным количеством возбужденных тяжелых экситонов для осуществления процесса передачи заметной доли энергии легким экситонам.

Определены особенности нелинейного поглощения коллоидных растворов нанопластин CdSe с различной толщиной оболочки CdS при нестационарном однофотонном возбуждении экситонных переходов 35-ти пикосекундными импульсами второй гармоники лазера, работающего в режиме пассивной синхронизации мод. Обнаружено увеличение пропускания коллоидных растворов нанопластин на длине волны лазерного возбуждения (532 нм), которое было объяснено эффектом заполнения фазового пространства экситонов. Установлено, что величина интенсивности насыщения поглощения зависит от режима возбуждения экситонных состояний в системе [4]. Интенсивность насыщения поглощения при резонансном возбуждении экситонного перехода  $1hh-1e$  в 1,5 раза меньше, чем при резонансном возбуждении экситонного перехода  $1hh-1e$ , и в 3 раза

меньше, чем при нерезонансном возбуждении коротковолновой области экситонного перехода  $1h-1e$ .

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ Стабильность №20-32-70001 и Гранта Президента РФ для молодых ученых MD- 781.2021.1.2.

#### Литература

1. A.M. Smirnov, *et al*, Journal of Luminescence **229**, 117682, **2021**
2. A.M. Smirnov, *et al*, Solid State Communication **299**, 113651, **2019**
3. A.M. Smirnov, *et al*, JETP Letters **109**, 370, **2019**
4. A. M. Smirnov, *et al*, JETP Letters **109**, 454, **2019**

## ТЕРМОДИНАМИКА ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ – СТЕКЛО

Сон Л.Д.

*УрФУ, УрГПУ, ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург*  
*ldson@yandex.ru*

Теория перехода жидкость – стекло основана на изучении динамики, и именно ее характер позволяет различить эти два состояния. Анализ экспериментальных данных дал возможность еще в 1948 г. сформулировать т.н. парадокс Козмана – предположение, что существует конечная температура, при которой разница в энтропии между кристаллом и неупорядоченной фазой обращается в нуль. Эта идея легла в основу простой феноменологической теории Адама - Гиббса, которая и дает основные признаки, по которым принято отличать жидкость от стекла. Теория взаимодействующих мод [1] является наиболее расхожим примером развития этого «энтропийного» подхода. Тем не менее, стационарное, с использованием средних по ансамблю, описание также не лишено смысла. Например, оно имеет место в теории спинового стекла Эдвардса – Андерсона и Паризи (в качестве обзора см.[2]), которая близка к традиционному описанию фазовых переходов на основе параметра порядка (некоторого среднего, температурная зависимость которого при переходе имеет особенность). Мы покажем, что несмотря на различные исходные соображения, оба подхода по своей

структуре весьма похожи, так что существует единая математическая конструкция, на основе которой можно строить термодинамическую теорию стекла: каждому варианту теории взаимодействующих мод можно сопоставить некоторое усреднение по ансамблю.

Работа поддержана РФФ (проект 21-13-00202).

## Литература

1. В.Гётце. Фазовые переходы жидкость – стекло. М.: Наука, **1992**
2. С.Л.Гинзбург. Необратимые явления в спиновых стеклах. М.: Наука, **1989**

## О СКЛОННОСТИ К ОБЪЕМНОЙ АМОРФИЗАЦИИ РАСПЛАВОВ (Fe<sub>0,75</sub>B<sub>0,15</sub>Si<sub>0,1</sub>)-(Nb,Ta)

Стерхова И.В.<sup>1,2</sup>, Камаева Л.В.<sup>1,2</sup>, Щелкачев Н.М.<sup>2</sup>, Ладьянов В.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,  
Ижевск*

<sup>2</sup>*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,  
Троицк, Москва  
irina.sterkhova@mail.ru*

В настоящее время разработана группа объемно-аморфизирующихся сплавов на основе системы Fe-B-Si, легированной тугоплавкими элементами Ta или Nb. Эти сплавы являются хорошими магнитомягкими материалами с высокими механическими и коррозионными свойствами. Повышение стеклообразующей способности этих расплавов является актуальной задачей. При этом важным является как выбор состава сплава, так и определение оптимальных условий их получения из жидкой фазы (температура закалки, термовременная обработка расплава). Как было показано нами ранее для выбора составов сплавов и оптимальных условий закалки, обеспечивающие наилучшую аморфизируемость можно использовать анализ температурных и концентрационных зависимостей вязкости, переохлаждения и особенностей структурообразования при затвердевании от различных температур. В связи с этим в работе проведены исследования процессов

затвердевания расплавов  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{100-x}(\text{Ta},\text{Nb})_x$  ( $x=0-4$ ) в интервале скоростей  $1-10^{60}\text{C}/\text{с}$  и их взаимосвязь со структурой переохлажденного жидкого состояния.

Исследование процессов кристаллизации расплавов  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{100-x}(\text{Ta},\text{Nb})_x$  ( $x=0-4$ ) проводили методом дифференциального термического анализа на высокотемпературном анализаторе (ВТА 983) в режимах циклирования образца через интервал плавление-кристаллизация с последовательным повышением максимальной температуры нагрева расплава. Скорость нагрева составляла  $20^\circ\text{C}/\text{мин}$ , скорость охлаждения – от 20 до  $100^\circ\text{C}/\text{мин}$ . Процессы затвердевания исследовали на быстрозакаленных стержнях ( $V_{\text{охл}}\sim 10^3\text{K}/\text{с}$ ) и лентах ( $V_{\text{охл}}\sim 10^6\text{K}/\text{с}$ ). Оценка стеклообразующей способности проводили методом дифференциальной сканирующей калориметрии (DSC 404 C Pegasus). Долю аморфной фазы в быстрозакаленных стержнях оценивали по величине теплового эффекта кристаллизации, отнесенной к эффекту кристаллизации аморфной ленты соответствующего состава, который принимали за 100%. Для анализа структуры переохлажденных расплавов использовали метод *ab initio* молекулярной динамики.

Исследование процессов кристаллизации расплавов  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{100-x}\text{Ta}_x$  и  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{100-x}\text{Nb}_x$  ( $x=0-4$ ) показало, что независимо от скорости охлаждения наибольшую склонность к переохлаждению проявляют расплавы с 1ат.% Ta и 4ат.% Nb. При этом кристаллизация этих расплавов протекает в более узком температурном интервале. Величина температурного интервала кристаллизации зависит от температуры жидкой фазы перед охлаждением (для расплава  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{99}\text{Ta}_1$  наименьший интервал кристаллизации наблюдается при охлаждении от температур до  $1300^\circ\text{C}$  и выше  $1600^\circ\text{C}$ , а в случае расплава  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{96}\text{Nb}_4$  – выше  $1600^\circ\text{C}$ ), что связано с изменением условий зарождения и роста отдельных фаз: в случае расплава с 1ат.% Ta - промежуточных неравновесных фаз  $\text{Fe}_3\text{V}$  и  $\text{Fe}_2\text{Ta}$ , а в случае расплава с 4ат.% Nb –  $\text{NbV}_2$ . На основании этих результатов можно предположить, что в системах  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{100-x}\text{Ta}_x$  и  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{100-x}\text{Nb}_x$  ( $x=0-4$ ) наибольшую склонность к объемной аморфизации будут проявлять сплавы с 1ат.% Ta и 4 ат.% Nb, соответственно, при закалке от  $T>1600^\circ\text{C}$ , что подтверждает анализ процессов затвердевания быстрозакаленных лент и стержней этих сплавов.

Кроме того, проведенный метод *ab initio* молекулярной динамики анализ структуры переохлажденных расплавов

(Fe<sub>0,75</sub>B<sub>0,15</sub>Si<sub>0,10</sub>)<sub>99</sub>Ta<sub>1</sub> и (Fe<sub>0,75</sub>B<sub>0,15</sub>Si<sub>0,10</sub>)<sub>96</sub>Nb<sub>4</sub> показал, что легирование Ta или Nb расплава Fe-B-Si не изменяет основных особенностей его структуры и межатомного взаимодействия, обеспечивающих высокую аморфизуемость (малый радиус межатомного взаимодействия Fe-B и эффективное притяжение между атомами Fe и Si). При этом увеличивается диапазона радиусов взаимодействия компонент, что повышает способность к аморфизации этих расплавов.

Работа выполнена по теме НИР (№121030100001-3). Анализ атомного ближнего упорядочения в расплавах проводили при поддержке гранта РФФИ №18-12-00438.

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ПРЕДСКАЗАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ В КУБАНИТЕ CuFe<sub>2</sub>S<sub>3</sub>

Е. А. Панкрушина<sup>1</sup>, А. В. Ушаков<sup>2</sup>, М. М. Абд-Эльмегид<sup>3</sup>,  
С. В. Стрельцов<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup> *Институт геологии и геохимии им. А. Н. Заварицкого УрО РАН, ул. Академика Вонсовского 15, 620016 Екатеринбург, Россия.*

<sup>2</sup> *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской 18, 620137 Екатеринбург, Россия.*

<sup>3</sup> *II институт физики, университет г. Кёльна, Цюльпихерштрассе 77, 50937, Кёльн, Германия.*

<sup>4</sup> *Уральский Федеральный Университет, ул. Мира 19, 620002, Екатеринбург, Россия.*

[alexushv@mail.ru](mailto:alexushv@mail.ru)

В настоящее время в физике твердого тела широко изучаются механизмы формирования молекулярных орбиталей в кластерных магнетиках на основе *3d*, *4d* и *5d* металлов. В данной работе с помощью первопринципных DFT-расчетов исследуется электронная структура природного минерала CuFe<sub>2</sub>S<sub>3</sub>.

На данный момент имеется мало данных о физических свойствах CuFe<sub>2</sub>S<sub>3</sub> [1,2], исследования проводились только на природных образцах. В нормальных условиях кубанит является антиферромагнитным диэлектриком. Данные спектроскопии

Мёссбауэра показывают, что  $3d$ -состояния меди ( $\text{Cu}^{1+}$ ) полностью заселены, а, следовательно, ионы Fe имеют валентность  $3.5+$ . Данные рентгеновской спектроскопии указывают на то, что ионы Fe не разделяются на разные классы [3].

В данной работе было показано, что в димерах  $\text{Fe}_2\text{S}_6$  наблюдаются формирование молекулярных орбиталей в  $t_{2g}$ -оболочке Fe и тенденция к перераспределению заряда на ионах Fe (зарядовое упорядочение), что вкуче приводит к открытию диэлектрической щели в зонном спектре.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФ 20-62-46047 .

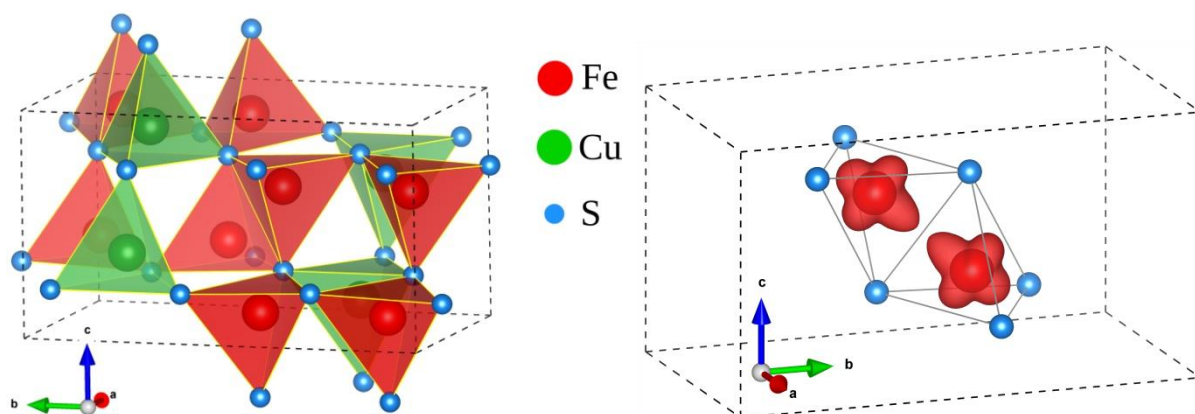


Рис. 1. Кристаллическая структура  $\text{CuFe}_2\text{S}_3$  (слева), тетраэдры  $\text{FeS}_4$  соединены через общее ребро, и распределение зарядовой плотности  $x_u$ -симметрии в димерах железа (справа).

## Литература

1. M. G. Townsend, J. L. Horwood, J. R. Gosselin, *Can. J. Phys.*, **51**, 2162, **1973**
2. A. W. Sleight, J. L. Gillson, *J. Solid State Chem.*, **8**, 29-30, **1973**
3. J. T. Szymanski, *Z. Kristallogr.* **140**, 240-248, **1974**

# ДИССОЦИАЦИЯ ЭКСИТОНОВ КАК ПЕРВЫЙ ЭТАП ПЕРЕХОДА РАЗОГРЕТОГО ПЛОТНОГО ВОДОРОДА В ПЛАЗМУ

Федоров И.Д.<sup>1,2</sup>, Стегайлов В.В.<sup>1,2,3</sup>

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

<sup>2</sup>*Московский Физико-Технический Институт (национальный исследовательский университет)*

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

[ilya.d.fedorov@phystech.edu](mailto:ilya.d.fedorov@phystech.edu)

Несмотря на кажущуюся простоту, водород оставляет немало вопросов касательно своего поведения в условиях сильного сжатия и нагрева. При таких условиях даже наличие в атоме всего одного электрона заставляет рассматривать многоэлектронные эффекты и отдельную электронную динамику, что значительно усложняет расчеты, заставляя маневрировать между различными упрощениями и необходимостью оставаться в рамках *ab initio* теории.

При этом на сегодняшний день уже есть упрощенные модели поведения водорода при высоких давлениях, в том числе описывающие его поведение и некоторые металлические свойства внутри больших планет, и они уже используются в астрофизике, однако они построены из экспериментальных данных и не имеют достаточного теоретического фундамента. Кроме того, тот факт, что на данный момент нет численных методов, способных достаточно точно описать при высоких давлениях поведение такого простейшего элемента как водород, что ставит еще и фундаментальную задачу доработки и исследования применимости существующих вычислительных методов.

Переход во флюидном водороде из диэлектрического молекулярного в проводящее плазменное состояние при давлениях порядка 100 ГПа активно исследуется различными экспериментальными группами на протяжении последних 30 лет. При этом нет согласия как по положению, так и по трактовке механизма перехода среди различных экспериментальных групп. Совершались попытки разделения экспериментов по типам наблюдаемых эффектов (поглощение энергии, рост отражательной способности и



проводимости) и характерам сжатия (ударное и статическое сжатие), однако и они не привели к единому мнению о переходе.

Среди теоретических подходов к изучению перехода наиболее заметным является метод адиабатической Борн-Оппенгеймеровской динамики с теорией функционала плотности в формулировке конечных температур. Этот подход показал, что в области перехода наблюдается диссоциация молекулярного водорода, которая приводит к росту проводимости, и качественно объяснил некоторые из наблюдаемых эффектов. Однако он не объяснял обнаруженное некоторыми группами различие в моментах начала поглощения энергии и роста оптической проводимости. Кроме того, в рамках этого подхода, только учет энергии нулевых колебаний мог объяснить изотопический эффект, однако он давал лишь около 100 К, против порядка 400 К в экспериментальных наблюдениях [1]. И самое главное, энергия, необходимая на диссоциацию молекулярного водорода, получалась примерно в 50 раз меньше той, что наблюдалась в рамках конечно-элементного анализа экспериментов [2].

Основой данной работы также является теория функционала плотности, однако мы ставим под сомнение применимость равновесного Борн-Оппенгеймеровского приближения и исследуем влияние неадиабатических неравноценных электронных эффектов на результат. Для этих целей мы используем метод Restricted Open-Shell Kohn-Sham, позволяющий корректно описывать первое возбужденное состояние системы, совместно с Surface-Hopping, позволяющим моделировать отдельные электронные переходы между основным и первым возбужденным состоянием. В рамках работы мы обнаружили в области предполагаемого перехода возможность электронных возбуждений в молекулярном водороде и показали, что времена жизни таких возбуждений достаточно большие и не позволяют описывать систему в рамках равновесной электронной динамики [3]. Кроме того, мы показали, что в области перехода, помимо возбуждения электронной подсистемы и образования связанной электрон-дырочной пары, происходит дальнейшая диссоциация этой пары (экситона) еще до разрушения молекулярного состава флюидной фазы [4]. Такой многоступенчатый процесс диссоциации молекулярного водорода, связанный с неадиабатическими процессами образования и диссоциации экситонов, может объяснить как большую удельную теплоту перехода, так и отложенный рост оптической проводимости при нагреве, а также достаточно большой

изотопический эффект, поскольку в рамках такой интерпретации механизм является существенно неравновесным.

## Литература

1. M. Zaghoo, R.J. Husband, I.F. Silvera, Phys. Rev. B, **98**,104102, **2018**
2. M. Houtput, J. Tempere, I.F. Silvera, Phys. Rev. B, **100**, 134106, **2019**
3. I. D. Fedorov, N.D. Orekhov, V.V. Stegailov, Phys. Rev. B, **101**, 100101, **2020**
4. И.Д. Федоров, В.В. Стегайлов, Письма в ЖЭТФ, 113.6, 396-398, **2021**

## ЦИКЛИЧЕСКОЕ ДВОЙНИКОВАНИЕ В МИКРОКРИСТАЛЛАХ КАРБИДА БОРА И АЛМАЗА

Филоненко В.П.

*Институт физики высоких давлений РАН, Москва, г. Троицк*  
[filv@hppi.troitsk.ru](mailto:filv@hppi.troitsk.ru)

В данной работе представлены результаты синтеза в условиях высоких давлений и структурного анализа микрокристаллов звездообразной формы карбида бора (Рис. 1) со стехиометрией  $B_{19}C$  и пятилучевых звезд алмаза с высокой степенью борирования (Рис. 2). Кристаллы карбида бора формировались при 7.0 ГПа и 1100 °С в результате деструкции М-карборана ( $C_4B_{10}H_{10}O_2$ ) [1]. Микроскопия высокого разрешения и электронная дифракция показали, что образование необычных кристаллов  $B_{19}C$  возможно благодаря двугранному углу  $71,8^\circ$  в ромбоэдрической элементарной ячейке и циклическому двойникованию с несоответствием  $\approx 1^\circ$ .

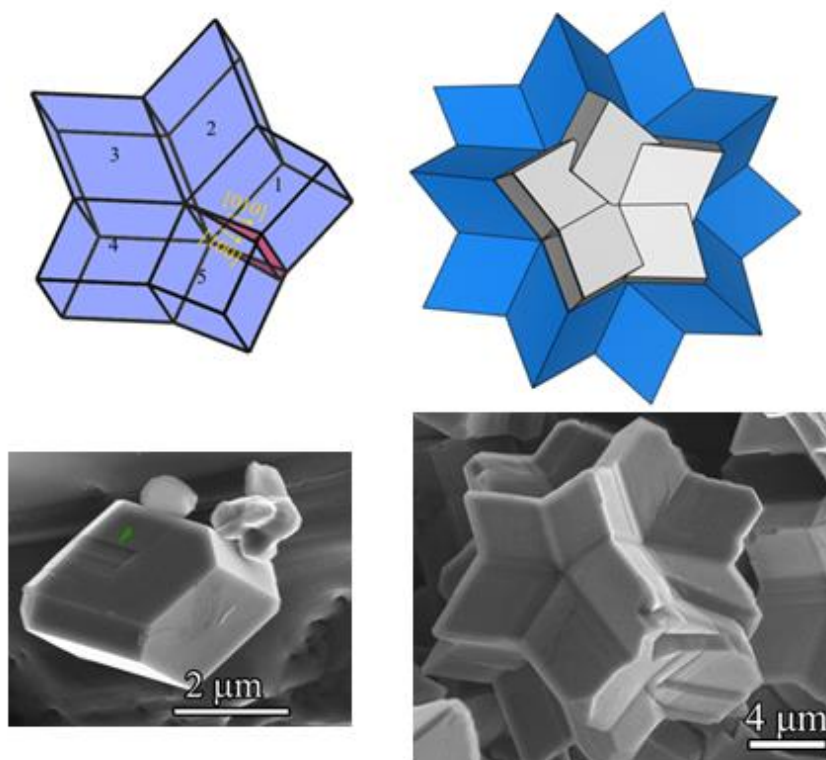


Рис. 1. Модель пятилучевой звезды и звездчатого многогранника, кристаллы карбида бора со стехиометрией  $B_{19}C$

Микрочастицы алмаза с морфологией пятилучевых звезд были получены при термобарической обработке смесей адамантана ( $C_{10}H_{16}$ ) с аморфным бором (8.0 ГПа, 1700 °С). Рентгеновский анализ и Рамановская спектроскопия показали, что они имеют степень допирования бором, замещающим углерод, на уровне 2-3 ат. %.

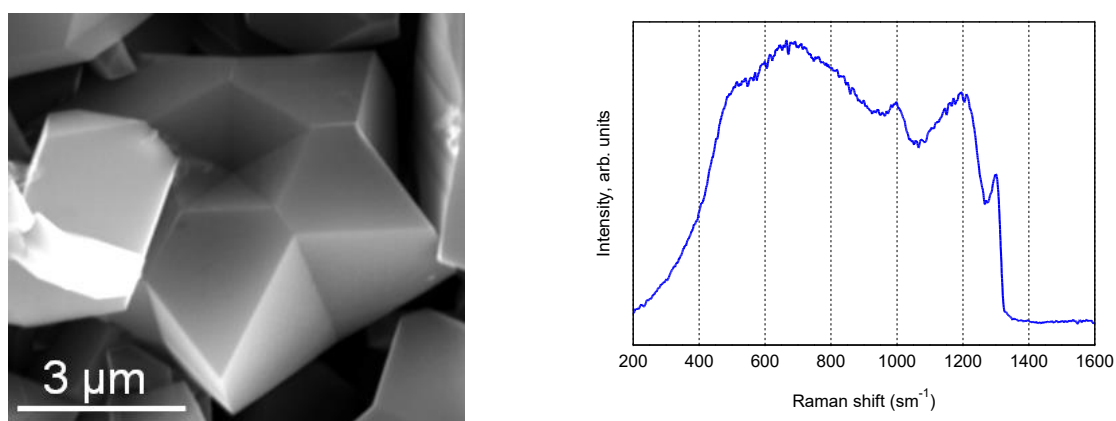


Рис. 2. Микрочастица борированного алмаза с формой пятилучевой звезды и его Рамановский спектр

Известно, что для частиц металлов (Pt, Au, Ag, Cu) размеры кристаллов с элементами пятой симметрии не превышают сотен

нанометров. С увеличением размеров частиц в них накапливаются напряжения, приводящие к потере устойчивости. В то же время икосаэдрические и звездчатые кристаллы материалов с высокими упругими модулями (В, В<sub>6</sub>О, В<sub>х</sub>С и алмаз) могут сохраняться до размеров в десятки микрометров, что подтверждается нашими результатами. Одной из причин этого является аккомодация углового несоответствия за счет дефектов решетки у двойниковых границ. Морфология полученных нами кристаллов карбида бора и алмаза объясняется реализацией при росте механизма циклического двойникования, который чаще всего наблюдается в кристаллах с гранцентрированной кубической или кубической алмазной решеткой при низкой энергии двойниковых границ. В идеале кристаллы состоят из равноразмерных субъединиц с общей осью пятикратной симметрии и имеют форму декаэдра (пятиугольная бипирамида), икосаэдра или пятилучевой звезды. Субблоки регулярной решетки не могут образовать полную заполняющую пространство структуру. Например, для декаэдра остается угловое несоответствие 7,35°. Поэтому кристаллы, формирующиеся по механизму циклического двойникования, имеют псевдопятую симметрию, но не являются псевдокристаллами.

## Литература

1. V. P. Filonenko, P. V. Zinin, I. P. Zibrov, etc. Crystals. **8**, 448, **2018**

## ЛОКАЛЬНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ РАВНОВЕСНОГО И ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ РАСПЛАВОВ НИКЕЛЯ

Хайруллина Р.Р.<sup>\*</sup>, Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В.  
*Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
Институт физики  
<sup>\*</sup>e-mail: raniya-art@mail.ru*

Переохлажденные переходные металлы характеризуются отсутствием дальнего порядка и наличием специфического ближнего порядка в расположении атомов. Так, наличие плеч и уширений во втором максимуме в экспериментально-измеряемой величине – в

статическом структурном факторе  $S(k)$  – принято трактовать как проявление икосаэдрического (идеального или искаженного) ближнего порядка (ISRO – *Icosahedral Short-Range Order*). Икосаэдрический ближний порядок представляет собой структуры с пятилучевой симметрией в расположении атомов, что может обуславливать возможность достижения системой глубоких переохлаждений.

В настоящей работе исследуются локальные структурные особенности равновесного и переохлажденного расплава никеля при различных протоколах охлаждения ( $\gamma \in [10^{10}, 10^{11}]$  К/с) с целью выяснения механизма образования икосаэдрического ближнего порядка в чистых  $3d$ -переходных металлах. Никель представляет собой типичный  $3d$ -переходный металл, который при температурах выше температуры плавления  $T_m$  и атмосферном давлении, характеризуется жидкой фазой высокой плотности. Как и остальные высокоплотные жидкости, при температурах ниже  $T_m$  и достаточно высоких скоростях охлаждения ( $\gamma \geq 1.5 \cdot 10^{13}$  К/с), никель формирует метастабильные переохлажденные состояния [1]. Эксперименты с применением бесконтейнерных методов охлаждения установили возможность глубокого переохлаждения никеля вплоть до  $\Delta T_s = 480$  К [2]. С учетом температуры плавления никеля ( $T_m = 1728$  К) последнее значение дает переохлаждение  $\Delta T_s / T_m \approx 0.28$ , что является достаточно большой величиной для чистых металлов с относительно высокой температурой плавления [3]. В отличие от жидких щелочных металлов, где межатомные взаимодействия достаточно корректно воспроизводятся простыми сферически-симметричными псевдопотенциалами, жидкие переходные металлы, характеризуются сложными многочастичными взаимодействиями. Так, характер межатомного взаимодействия в переходных металлах обуславливается присутствием  $d$ -орбитальных электронов, которые гибридизуются с  $s$ -орбитальными электронами [4]. Как результат, ближний структурный порядок в жидких переходных металлах характеризуется рядом специфических особенностей и сложным набором корреляционных длин [5]. Недавние молекулярно-динамические исследования выявили наличие в переохлажденных расплавах и аморфных металлических сплавах так называемые искаженные икосаэдрические структуры [4,5]. Было установлено, что структура переохлажденных переходных металлов характеризуется сложными многогранниками Франка-Каспера с координационными числами  $z = 14 \div 16$ . Ближний структурный порядок таких расплавов

является предметом научного интереса, поскольку считается, что локальная структура расплавов оказывает заметное влияние на ее микроскопическую коллективную динамику, транспортные свойства, аморфообразующую способность и др.

Комплексные исследования равновесных свойств расплавов никеля были выполнены с помощью крупномасштабного моделирования молекулярной динамики, структурного и кластерного анализа. Найдено хорошее согласие результатов моделирования для равновесного расплава никеля с данными рентгеноструктурного анализа. Установлено, что переохлажденные расплавы никеля не содержат каких-либо идеальных или искаженных кластеров с икосаэдрической (5-лучевой) симметрией. Также было установлено, что кристаллизация никеля при достаточно высоких скоростях охлаждения ( $\gamma \in [10^{10}, 10^{11}] \text{K/s}$ ) осуществляется по поликристаллическому сценарию с образованием кристаллических кластеров с ГЦК и ГПУ симметриями.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 19-12-00022).

## Литература

1. F. Li, X.J. et al, *Intermetallics* **19**, 630, **2011**
2. R. Willnecker, D.M. Herlach et al, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1339, **1986**
3. D.V. Louzguine-Luzgin et al, *J. Chem. Phys.* **151**, 124502, **2019**
4. D.K. Belashchenko, *Phys. Usp.* **56**, 1176, **2013**
5. A.V. Mokshin, R.M. Khusnutdinoff, B.N. Galimzyanov, V.V. Brazhkin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 4122, **2020**

# ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРКАЛЯЦИИ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ В БИСЛОЙНЫЙ ГРАФЕН И MoS<sub>2</sub>

Чепкасов И.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Сколковский институт науки и технологий, 143026, Большой бул.,  
30 Москва, Россия

*I.Chepkasov@skoltech.ru*

Вопреки широко распространенному мнению, что атомы щелочного металла, внедренные в слоистые материалы, образуют только однослойные структуры, недавние эксперименты [1] показали, что в двухслойном графене возможны многослойные конфигурации лития. Используя современные расчеты из первых принципов, мы систематически изучаем энергию интеркаляции для различных щелочных металлов (Li, Na, K, Rb, Cs) в двухслойном графене и MoS<sub>2</sub>, а также комбинированной структуре графен/MoS<sub>2</sub>. Квантово-механические расчеты были выполнены с помощью метода функционала электронной плотности (DFT), реализованного в программном пакете VASP [2].

Для оценки энергетики формирования данных структур, мы рассчитали энергию формирования для каждой структуры. В случае для двухслойного графена энергия образования многослойных структур отрицательна для K, Rb и Cs и лишь немного положительна для Li, так и для Na. В MoS<sub>2</sub> многослойные структуры щелочных металлов значительно выше по энергии, чем однослойные, но образование первых все же может происходить, особенно для щелочных металлов с наименьшей электроотрицательностью. Чтобы рационализировать результаты, мы так же оценили перенос заряда от интеркалянтов к анодному материалу и проанализировали характер связи между атомами щелочных металлов, графена и MoS<sub>2</sub>. Хотя наши теоретические исследования в основном сосредоточены на фундаментальных аспектах интеркаляции щелочных металлов, наши результаты могут стимулировать экспериментальные работы по изучению многослойной интеркаляции, чтобы максимизировать емкость анодных материалов в ионных батареях.

Исследование выполнено при поддержке гранта DAAD «Михаил Ломоносов» и государственного задания.

## Литература

1. Chepkasov I. V. et al. Alkali metals inside bi-layer graphene and MoS<sub>2</sub>: Insights from first-principles calculations //Nano Energy. – 2020. – Т. 75. – С. 104927. <https://www.vasp.at/>

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФТОРИДОВ СЕРЕБРА ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Чепкасов И.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Сколковский институт науки и технологий, 143026, Большой бул.,  
30 Москва, Россия

*I.Chepkasov@skoltech.ru*

Изучение фторидов переходных металлов является важным направлением исследований. В частности, в последнее время фториды металлов (Cu / Ag / Au-F) привлекают большое внимание, в связи с их перспективными свойствами. Так же применяя теоретические методы предсказания структур, в последнее время во всех трех (Cu / Ag / Au-F) системах были предсказаны ряд до сих пор неизвестных фаз [1–3]. Система Cu – F важна в связи с применением CuF<sub>2</sub> в электрохимии, а также Cu-F и Ag-F проливают свет на потенциально новый путь к сверхпроводимости. Новые фазы Au-F демонстрируют экзотическую химию [2]. Примечательно, что открытие новых соединений стало возможным благодаря теоретическим исследованиям химического пространства этих систем [1–3]. В этой работе мы представляем первопринципное исследование эволюционной кристаллической структуры переменного состава для всех фаз в системе Ag-F. Здесь мы восстанавливаем экспериментально известную структуру Ag-F и сообщаем неизвестные до сих пор стабильные фазы с описанием электронных свойств этих материалов. Прогнозирование кристаллической структуры выполняется при разном давлении.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 19-72-30043.



## Литература

1. Rybin N. et al. Novel Copper Fluoride Analogs of Cuprates //Physical Chemistry Chemical Physics. – **2021**
2. Lin J. et al. Gold with+ 4 and+ 6 oxidation states in AuF<sub>4</sub> and AuF<sub>6</sub> //Journal of the American Chemical Society. – 2018. – Т. 140. – №. 30. – С. 9545-9550
3. Kurzydłowski D. et al. Fluorides of silver under large compression //arXiv preprint arXiv:2012.09583. – **2020**

## **V<sub>3</sub>S<sub>4</sub> НОВЫЙ ДВУМЕРНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В СЕНСОРИКЕ**

Чепкасов И.В.<sup>1</sup>, Квашнин А.Г.<sup>1</sup>, Попов З.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Сколковский институт науки и технологий, 143026, Большой бул., 30 Москва, Россия

<sup>2</sup> Институт биохимической физики им. Н.М.Эмануэля РАН, 119334, ул. Косыгина 4, Москва, Россия  
[ilya\\_chepkasov@mail.ru](mailto:ilya_chepkasov@mail.ru)

Двумерные дихалькогениды переходных металлов привлекают большой интерес ученых благодаря своим уникальным свойствам. В частности, один из таких представителей это VS. В недавних исследованиях двумерный VS<sub>2</sub> был экспериментально синтезирован, и показал перспективность использования в качестве ферромагнитного полупроводника, двумерного анода для ионных аккумуляторов. Так же наноразмерный двумерный VS<sub>2</sub> показал перспективные сенсорные свойства. В частности, в работе [1] было продемонстрировано что адсорбция молекул NO и NO<sub>2</sub> на двумерном VS<sub>2</sub> приводит к изменению электронных свойств с полупроводниковых на полуметаллические в то же время адсорбция других молекул не меняет электронные свойства.

Как показали недавние исследования, двумерные дихалькогениды также могут образовывать нестехиометрические фазы. Например, в работе [2] было показано, что могут существовать нестехиометрические 2D-фазы MoSe<sub>2</sub> и других MX<sub>2</sub> (M = Mo, W; X = S, Se, Te) с низкими энергиями образования. При этом фазы 2D M<sub>4</sub>X<sub>4</sub>

и  $M_5X_2$  особенно стабильны. Данные фазы были найдены в процессе теоретических исследований с использованием эволюционных алгоритмов, в частности кода USPEX [3,4], который является мощным инструментом для прогнозирования стабильных соединений.

В данной работе с использованием эволюционного алгоритма USPEX была найдена стабильная двумерная фаза  $V_3S_4$  и детально исследованы ее электронные и сенсорные свойства.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 20-53-05009.

### Литература

1. Zhao R. et al. VS<sub>2</sub> nanosheet as a promising candidate of recycle and reuse NO<sub>2</sub> gas sensor and capturer: a DFT study //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2021. – Т. 33. – №. 16. – С. 165501.
2. Joseph T. et al. Nonstoichiometric phases of two-dimensional transition-metal dichalcogenides: from chalcogen vacancies to pure metal membranes //The journal of physical chemistry letters. – 2019. – Т. 10. – №. 21. – С. 6492-6498.
3. Lyakhov A. O. et al. New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX //Computer Physics Communications. – 2013. – Т. 184. – №. 4. – С. 1172-1182
4. Oganov A. R., Glass C. W. Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications //The Journal of chemical physics. – 2006. – Т. 124. – №. 24. – С. 244704.

## ОБЗОР АППАРАТУРЫ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И ПЕРСПЕКТИВЫ ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО РАЗВИТИЯ

Шацкий А.Ф.<sup>1,2</sup> и Литасов К.Д.<sup>2</sup>

*Новосибирский государственный университет*

*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф.Верецагина РАН*

*shatskiyantonnf@gmail.com*

Твердофазные аппараты высокого давления с одноосным и многоосным сжатием для создания контролируемых статических давлений и температур широко используются в промышленности для получения алмаза и кубического нитрида бора, а также в области фундаментальных научных исследований вещества [1-6]. В основе всех этих аппаратов лежит принцип мультипликации. Аппараты с одноосным сжатием охватывают самый широкий диапазон температур и давлений, от 0.5-3.0 ГПа и до 1200 °С для аппарата цилиндр-поршень; 3-10 ГПа Бэлт; 5-11 ГПа (до 20-30 ГПа с наковальнями из спёка алмаза) для аппаратов типа тороид; до 300 ГПа для алмазных наковален с нагревом до 4000-5000 К. Относительная простота конструкции и широкий доступ для спектральных исследований являются несомненными преимуществами аппаратов с одноосным сжатием. Среди недостатков следует отметить, отклонение от гидростатичности, высокие температурные градиенты, низкая точность определения давления и температуры, малый размер образца. Данные недостатки обычно возникают при генерации давлений выше 5-12 ГПа). В аппаратах с многоосным сжатием используется сразу несколько наковален, число которых определяет геометрию сжимаемого объема: 4 – тетраэдр, 6 – куб и 8 – октаэдр. Основным преимуществом многопуансонных аппаратов является возможность создания давления в объемном образце при давлениях от 3-10 до 30-50 ГПа с использованием в качестве материала пуансонов карбида вольфрама и до 60-120 ГПа – с использованием алмазного спёка. На сегодняшний день наиболее широко используются аппараты с кубической и октаэдрической формой сжимаемого объема. Среди аппаратов, применяемых для сжатия многопуансонных блоков, наибольшее развитие получили одноосные пресса с нажимными плитами типа DIA (конфигурация Осуги) и разрезная-сфера (конфигурация Каваи), кубические аппараты с шестью независимыми гидроцилиндрами (конфигурация Холла) и

аппараты в которых многопуансонный блок обжимается маслом (конфигурация Вон Платена).

В докладе будут отражены основные этапы развития аппаратов высокого давления, многообразии существовавших и существующих аппаратов и перспективы дальнейшего развития техник высокого давления. Особое внимание будет уделено принципам генерации давления и температуры, материалам деформируемых уплотнений и ячеек высокого давления в аппаратах с большим сжимаемым объемом.

## Литература

1. A. Shatskiy et al. Am. Miner., **92**, 1744-1749, **2007**
2. A. Shatskiy et al. Rev. Sci. Instr., **80**, 023907, **2009**
3. A. Shatskiy et al. High Pressure Res., **30**, 443-450, **2010**
4. A. Shatskiy et al. Am. Miner., **96**, 541-548, **2011**
5. A. Shatskiy et al. Phys. Earth. Planet. Inter., **189**, 92-108, **2011**
6. А.Ф. Шацкий, К.Д. Литасов, Условия образования карбонатов и механизм миграции карбонатных расплавов в мантии Земли. Изд. СО РАН, 247, **2015**

## АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПРОФИЛИ ДВУМЕРНЫХ СКИРМИОНОВ

Шустин М. С.<sup>1</sup>, Поткина М. Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, [mshustin@yandex.ru](mailto:mshustin@yandex.ru)

<sup>2</sup>Университет ИТМО, 197101, Санкт-Петербург, [potkina.maria@yandex.ru](mailto:potkina.maria@yandex.ru)

Скирмионы представляют собой топологически нетривиальные полевые конфигурации, являющиеся решениями нелинейных дифференциальных уравнений физики. Изначально такие решения были рассмотрены Т. Скирмом в ядерной физике для барионного поля [1]. В дальнейшем аналогичные распределения полей параметра порядка были найдены в магнитных системах и жидких кристаллах [2]. Более того, сравнительно недавно магнитные скирмионы были найдены экспериментально [3], что стимулировало к ним

значительный практический интерес, как к перспективным объектам для создания элементной базы устройств логики и памяти нового поколения [4]. Основой практических разработок магнитных скирмионов является свойство их топологической устойчивости, а именно, невозможности перевести нетривиальное распределение поля намагниченности с топологическим индексом  $Q$  в распределение, отвечающее другому гомотопическому классу (другому значению  $Q$ ), без преодоления энергетического барьера. До недавнего времени рассматривались только магнитные скирмионы с  $Q = -1$ . Однако в недавних работах [5, 6] для 2D случая на основе численных расчетов было предсказано существование скирмионов с произвольными значениями  $Q$ . Данное открытие существенно расширяет перспективы исследования таких структур. В частности, приобретает актуальность развитие аналитической теории, позволяющей описывать полевые конфигурации с произвольными значениями  $Q$  посредством аналитических выражений.

В настоящей работе доказана эквивалентность различных аналитических подстановок для радиальных профилей магнитных скирмионов с топологическим индексом  $Q = -1$ , активно используемых в настоящее время [7, 8]. Далее, посредством обобщения данных профилей найдено аналитическое выражение для магнитного скирмиониума с  $Q = 0$  и других центрально симметричных вихревых магнитных структур, найденных как в численных, так и физических экспериментах [5, 6, 9, 10]. Дальнейшее обобщение выражения для магнитного скирмиониума позволило получить аналитические подстановки для киральных магнитных структур с произвольными топологическими индексами. Результаты численных расчетов сравнивались с результатами численных экспериментов, и обнаружено количественное согласие профилей с расхождениями пространственных зависимостей, не превышающими нескольких процентов.

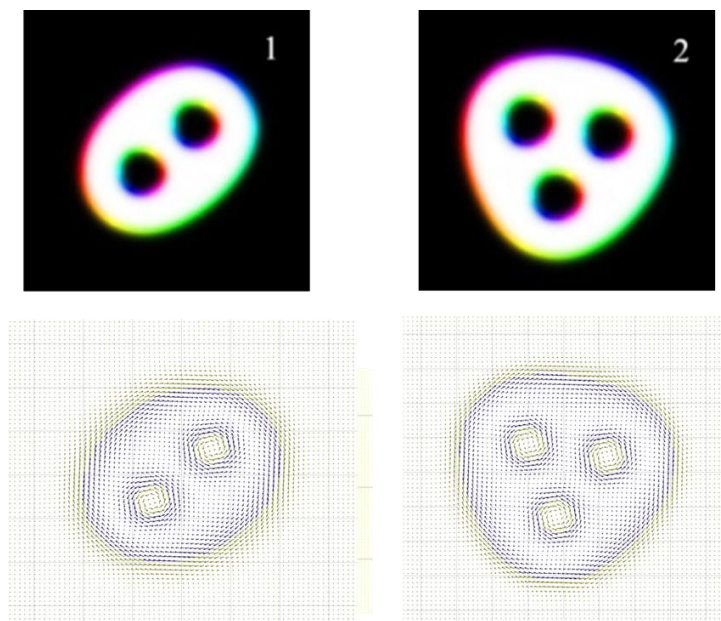


Рисунок 1. Полевые конфигурации скирмионов с  $Q=1,2$ . Сверху – результаты численных расчетов работы [5]. Снизу – результаты построения по предложенной в работе аналитической формуле.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 19-02-00348, 19-32-90048), Правительства Красноярского края и Краевого фонда науки (проект № 20-42-243001), Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проекты № 20-1-4-25-1, 19-1-1-12-2).

#### Литература

1. T.H.R. Skyrme, Proc. R. Soc, Lond. Ser. A 260, 127, **1961**
2. A.N. Bogdanov and D.A. Yablonsky, Sov. Phys. JETP 95, 178, **1989**
3. C. Moreau-Luchaire et al., Nat. Nanotechnol. 11, 444, **2016**
4. G. Yu et al., Nano Lett. 17, 1, 261–268, **2017**
5. F.N. Rybakov, N.S. Kisel, Phys. Rev. B 99, 064437, **2019**
6. D. Foster et.al., Nature Physics 15, 655, **2019**
7. X. S. Wang et al., Comm. Phys. vol. 1, 31, **2018**
8. N. Romming et al. Phys. Rev. Lett. 114, 177203, **2015**
9. X. Zhang et al. Phys. Rev. B 94(9), P.094420, **2016**
10. B. Seng et.al., arXiv:2102.13502, **2021**

## ФОНОНЫ КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ МАГНЕТИТА: РАСЧЕТЫ В РАМКАХ DFT+U

Шутикова М.И.<sup>1,2</sup>, Стегайлов В.В.<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский Физико-Технический Институт (национальный  
исследовательский университет)

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет "Высшая школа  
экономики"

*shutikova\_maria@mail.ru*

Магнетит ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) - магнитный оксид железа с сильными корреляциями в электронной подсистеме. При температуре 120 К в нем происходит структурный переход Вервея, связанный, как полагают, с зарядовым и орбитальным упорядочением. Выше температуры Вервея находится кубическая фаза магнетита, перспективная для многих современных приложений. В докладе будут представлены результаты анализа литературы и проведенных расчетов для кубической фазы магнетита [1]. Экспериментальные и расчетные данные дают противоречивые данные о ее свойствах, в частности, о наличии или отсутствии в ней запрещенной зоны, зарядового и орбитального упорядочения [2], а также о ее устойчивости [3].

В докладе будет проанализировано влияние ключевых параметров модели DFT+U (значения эффективной поправки Хаббарда, размера расчетной сверхячейки, начальных приближений к волновым функциям и электронной плотности) на описание электронной структуры кубической фазы магнетита. Будет обсуждаться свойственная методу DFT+U проблема локальных минимумов; будут описаны найденные варианты зарядового и орбитального упорядочения в кубической фазе магнетита [1]. Кроме того, будут представлены первые результаты исследования фононов в кубической фазе, в рамках подхода, аналогичного TDEP [4].

### Литература

1. М.И. Шутикова, В.В. Стегайлов, ЖЭТФ, **160**, 2(8), 1-26, **2021**
2. Н. Liu и С. Di Valentin, J. Phys. Chem. C, **121**,46, 25736–25742, **2017**
3. Р. Piekarz и др., Phys. Rev. B, **103**, 10, 104303, **2021**
4. О. Hellman, Р. Steneteg, I. A. Abrikosov, и S. I. Simak, Phys. Rev. B, **87**,10,104111, **2013**

## ОРИГИНАЛЬНЫЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Яруллин Д. Т., Галимзянов Б. Н., Мокшин А. В.

*Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань*

*YarullinDT@gmail.com*

Кинетические факторы кристаллизации: скорость пристёгивания частиц  $g^+$  к поверхности зародыша и скорость отстёгивания частиц  $g^-$  от поверхности зародыша, являются одними из наиболее фундаментальных величин при описании кинетики зародышеобразования и роста кристаллических структур [1]. Вместе с тем данные величины являются наименее исследованными среди кинетических характеристик кристаллизации. Так, несмотря на огромное количество проведенных экспериментальных и симуляционных исследований, посвященных кинетике кристаллизации переохлажденных жидкостей и стекол, до сих пор не установлено соответствие между размерами кристаллических зародышей и кинетическими факторами кристаллизации. Одной из причин этого является отсутствие методов, позволяющих проводить оценку скорости отстёгивания частиц от поверхности кристаллического зародыша. Также стоит отметить, что скорость пристёгивания ранее оценивалась лишь для зародышей вблизи энергетического барьера зародышеобразования.

В настоящей работе будет представлен оригинальный подход к симуляционной оценке кинетических факторов кристаллизации. Представленный подход может быть применен для зародышей любого размера и позволяет оценить как скорость пристёгивания  $g^+(N)$ , так и скорость отстёгивания  $g^-(N)$  [2].

Апробация подхода проведена на примере кристаллизации переохлажденной системы Леннарда-Джонса (LJ). Мы показываем, что в условиях, когда изменение размера кристаллических зародышей обусловлено лишь пристёгиванием/отстёгиванием мономеров, что, как правило, реализуется на начальных этапах кристаллизации, размерная зависимость кинетических факторов кристаллизации описывается баллистической моделью. Кроме того, мы представляем результаты оценки влияния коалесценции на кинетику кристаллизации зародышей при различных уровнях переохлаждения. Так, было обнаружено, что на поздних этапах кристаллизации



влияние коалесценции на кинетические факторы кристаллизации ослабевает. Это свидетельствует о том, что на поздних этапах кристаллизации рост кластеров главным образом происходит в результате пристёгивания мономеров.

Предложенный в настоящей работе подход имеет ряд исключительно важных достоинств, способствующих тому, чтобы данный подход стал незаменимым инструментом при оценке кинетических характеристик кристаллизации.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (Проект № 20-1-2-38-3).

## Литература

1. D. Kashchiev, Nucleation: Basic Theory with Applications (Butterworth-Heinemann, Oxford, **2000**)
2. D. T. Yarullin, B. N. Galimzyanov, A. V. Mokshin, The Journal of Chemical Physics, **152**, 22, 224501, **2020**