



**XIX Всероссийская конференция**

**ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ  
ТВЁРДОГО ТЕЛА  
И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ**

**Сочи, пансионат «Буревестник»  
18–27 сентября 2020 г.**

**ТЕЗИСЫ**

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

ХІХ Всероссийская конференция  
«Проблемы физики твердого тела  
и высоких давлений»

г. Сочи, пансионат «Буревестник»  
18 – 27 сентября 2020 г.

ТЕЗИСЫ

Москва, ФИАН 2020

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

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

**Редакционная коллегия:** В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН); П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН); А. А. Федянин, д.ф.-м.н., проректор (МГУ им. М. В. Ломоносова); В. Е. Антонов, д.ф.-м.н. (ИФТТ РАН); М. М. Глазов, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФТИ им. А. Ф. Иоффе); С. В. Демишев, д.ф.-м.н. (ИОФ РАН); Е. Н. Циок, к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

Проблемы физики твердого тела и высоких давлений:  
К26 Тезисы XIX Всероссийской конференции, г. Сочи, пансионат «Буревестник», 18–27 сентября 2020 г. – Москва–Сочи: Изд-во ФИАН, 2020. – 179 с.

Problems of solid state physics and high pressure science:  
Abstracts of the XIX All-Russian Conference, Sochi, “Burevestnik” pension, September, 18–27, 2020. – Moscow–Sochi: LPI RAS Publ., 2020. – 179 p.

**ISBN 978-5-902622-40-6**

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

**ISBN 978-5-902622-40-6**

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

© Коллектив авторов, 2020  
© ФИАН, 2020

## От редакции

Всероссийская школа-конференция «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» проводится Институтом физики высоких давлений РАН (первоначально Школа-семинар) каждые два года, начиная с 1989 г. На данный момент было организовано и проведено восемнадцать таких Конференций, все они проходили осенью на базе обособленного подразделения Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова – пансионат МГУ «Буревестник».

С течением времени увеличивалось количество молодых участников, интерес к участию в Конференции проявлял все более широкий круг ученых. В 2014 году Оргкомитет Конференции принял решение, начиная с 2015 года проводить данную конференцию ежегодно, организуя ее по очереди силами Института физики высоких давлений РАН, Физического института РАН и Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, для того, чтобы охватить большой круг молодых ученых и провести расширение тематики. Таким образом, проводимая ИФВД РАН в 2020 году Конференция будет 19-й в общем ряду конференций «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» и будет носить Всероссийский характер.

Целями Конференции являются создание условий, способствующих изучению современных достижений в области физики конденсированных сред, в том числе, с применением высоких давлений; содействие развитию научных исследований в области физики конденсированных сред с применением высоких давлений; привлечение ещё большего количества молодых ученых и содействие развитию их творческой научной активности. В течение последних двадцати лет Конференции организуются при существенной поддержке РФФИ.

Особенностью школы-конференции является обязательное устное выступление с оригинальными докладами всех молодых участников. Тезисы докладов публикуются в данном сборнике.

Презентации лекций и оригинальных докладов будут доступны на сайте XIX Конференции:

<http://www.hppi.troitsk.ru/meetings/school/XIX-2020/xix-sch.htm>

## **ОРГАНИЗАТОРЫ**

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

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

Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова

## **ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ**

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

## **ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

1. Председатель – В. Н. Рыжов, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
2. Заместитель Председателя – А. А. Федянин, д.ф.-м.н., проректор (МГУ им. М. В. Ломоносова)
3. В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
4. П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН)
5. Е. Н. Циок, к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
6. В. Е. Анкудинов, к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

**Мероприятие проводится при финансовой поддержке  
Российского фонда фундаментальных исследований:  
Проект № 20-02-22022**

## СОДЕРЖАНИЕ

От редакции.....	3
Организаторы.....	4
Содержание .....	5
Лекции .....	17
<b>Алексеев П. С.....</b>	<b>19</b>
ГИДРОДИНАМИКА            ВЯЗКОЙ            ДВУМЕРНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ЖИДКОСТИ	
<b>Бражкин В. В. ....</b>	<b>21</b>
«КВАНТОВЫЕ»            ЗНАЧЕНИЯ            «КЛАССИЧЕСКИХ» ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН	
<b>Васин М. Г. ....</b>	<b>22</b>
КРИТИЧЕСКАЯ            ДИНАМИКА            ПЕРЕХОДА БЕРЕЗИНСКОГО-КОСТЕРЛИЦА-ТАУЛЕСА	
<b>Глушков В. В. ....</b>	<b>22</b>
ОБМЕННОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ            И АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В $\text{EuV}_6$	
<b>Григорьев П. Д., Рамазашвили Р., Карцовник М. В. ....</b>	<b>24</b>
ЭФФЕКТИВНЫЙ            G-ФАКТОР            ЭЛЕКТРОНОВ, ИЗМЕРЯЕМЫЙ            ПО МАГНИТНЫМ            КВАНТОВЫМ ОСЦИЛЛЯЦИЯМ            В            АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛАХ	
<b>Демишев С. В. ....</b>	<b>25</b>
МАГНИТНЫЕ            СВОЙСТВА            ТОПОЛОГИЧЕСКОГО КОНДО ИЗОЛЯТОРА $\text{SmV}_6$ – НОВОЕ            И ХОРОШО ЗАБЫТОЕ СТАРОЕ	
<b>Дурнев М. В. ....</b>	<b>27</b>
КРАЕВЫЕ            ФОТОТОКИ            В            ДВУМЕРНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ	

<b><u>Злотников А. О., Аксенов С. В., Шустин М. С.</u> .....</b>	<b>28</b>
СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ С НЕТРИВИАЛЬНОЙ ТОПОЛОГИЕЙ, ИНДУЦИРОВАННОЙ СПИН- ОРБИТАЛЬНОЙ СВЯЗЬЮ И ГЕЛИКОИДАЛЬНЫМ СПИНОВЫМ УПОРЯДОЧЕНИЕМ, ПРИ УЧЕТЕ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ	
<b><u>Капуткина Н. Е., Алтайский М. В.</u>.....</b>	<b>30</b>
КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ КАК ЭЛЕМЕНТНАЯ БАЗА ДЛЯ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ	
<b>Литасов К. Д. ....</b>	<b>32</b>
ОПРЕДЕЛЕНИЕ МИКРОЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА СИНТЕТИЧЕСКОГО АЛМАЗА МЕТОДОМ МАСС- СПЕКТРОМЕТРИИ ИНДУКТИВНО-СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМЫ С ФЕМТОСЕКУНДНОЙ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИЕЙ	
<b>Манцевич В. Н. ....</b>	<b>34</b>
ДИНАМИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ	
<b>Маслова Н. С. ....</b>	<b>35</b>
ПЕРЕПУТАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ И КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ПОДСИСТЕМ ВО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУРАХ	
<b>Мельников А. С. ....</b>	<b>37</b>
МОДЫ ХИГГСА В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СИСТЕМАХ	
<b><u>Михеенков А. В., Валиулин В. Э., Кугель К. И., Щелкачев Н. М.</u> .....</b>	<b>39</b>
ЗАПУТАННОСТЬ НЕТОЖДЕСТВЕННЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ	
<b><u>Мокшин А. В., Хабибуллин Р. А., Мирзиярова Д. А., Мокшин В. В.</u>.....</b>	<b>41</b>
МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В РЕШЕНИИ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧ И НЕ ТОЛЬКО...	



<b><u>Муртазаев А. К., Бабаев А. Б.</u>.....</b>	<b>42</b>
ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ МОДЕЛЯХ ПОТТСА	
<b>Норман Г. Э.</b> .....	<b>43</b>
СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ АТОМИСТИЧЕСКОЕ МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	
<b><u>Ремизов С. В., Елистратов А. А.</u> .....</b>	<b>45</b>
РАЗВИТИЕ ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКИ ШВИНГЕРА- КЕЛДЫША ДЛЯ СПИНОВЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПОДХОДА ПОПОВА-ФЕДОТОВА	
<b><u>Рыжов В. Н., Гайдук Е. А., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.</u> .....</b>	<b>47</b>
СЦЕНАРИИ ПЛАВЛЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ - ОСОБЕННОСТИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ	
<b><u>Рыльцев Р. Е., Балякин И. А., Щелкачев Н. М.</u>.....</b>	<b>49</b>
МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ МАТЕРИАЛОВ	
<b>Садовский М. В.</b> .....	<b>51</b>
ПЛАНКОВСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В МЕТАЛЛАХ КАК ИЛЛЮЗИЯ	
<b>Случанко Н. Е.</b> .....	<b>52</b>
ПЕРЕХОДЫ МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР В РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ДОДЕКАБОРИДАХ $R_{1-x}Yb_xB_{12}$	
<b>Сон Л. Д.</b> .....	<b>53</b>
СТОХАСТИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ВБЛИЗИ БИНОДАЛИ	
<b>Стегайлов В. В.</b> .....	<b>54</b>
АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ТВЕРДОМ ТЕЛЕ	
<b>Стрельцов С. В.</b> .....	<b>55</b>
ОРБИТАЛЬНЫЕ СТЕПЕНИ СВОБОДЫ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ	



<b><u>Фомин Ю. Д., Циок Е. Н., Рыжов В. Н.</u>.....</b>	<b>56</b>
ВЗАПЕРТИ: ВЛИЯНИЕ КОНФАЙНМЕНТА НА ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ	
<b><u>Циок Е. Н., Фомин Ю. Д., Тареева Е. Е., Гайдук Е. А., Рыжов В. Н.</u>.....</b>	<b>57</b>
ВЛИЯНИЕ ПРИТЯЖЕНИЯ НА ФАЗОВУЮ ДИАГРАММУ И СЦЕНАРИЙ ПЛАВЛЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ С ОБОБЩЕННЫМ (n-m) ПОТЕНЦИАЛОМ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА	
<b><u>Щелкачев Н. М., Рыльцев Р. Е.</u> .....</b>	<b>59</b>
МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РАСПЛАВОВ	
<b><u>Крючков Н. П., Яковлев Е. В., Мистрюкова Л. А., Бражкин В. В. Юрченко С. О.</u>.....</b>	<b>60</b>
АНТИКРОССИНГ МОД В ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЯХ: ТЕОРИЯ И ПРЯМОЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ НАБЛЮДЕНИЕ	
Доклады .....	63
<b><u>Азаревич А. Н., Богач А. В., Глушков В. В., Демишев С. В., Гаврилкин С. Ю., Шицевалова Н.Ю., Филиппов В.Б., Габани С., Флахбарт К., Случанко Н.Е.</u> .....</b>	<b>65</b>
АНИЗОТРОПИЯ МАЛЬТИЙСКОГО КРЕСТА В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ $TmB_{12}$ С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ	
<b><u>Аксенов С. В., Вальков В. В., Каган М. Ю.</u>.....</b>	<b>67</b>
ДЕТЕКТИРОВАНИЕ МАЙОРАНОВСКИХ СОСТОЯНИЙ В ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОМ УСТРОЙСТВЕ С ТОПОЛОГИЧЕСКИМ СВЕРХПРОВОДНИКОМ	
<b><u>Анкудинов В. Е., Щелкачев Н. М.</u>.....</b>	<b>69</b>
МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПОЛЯ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ	

<b>Антанович А. А.</b> .....	<b>71</b>
КАРБОНИЗАЦИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ	
<b>Баграмов Р. Х.</b> .....	<b>73</b>
СТРУКТУРНЫЕ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ УГЛЕРОДОВ В ПРИСУТСТВИИ БОРА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ	
<b>Балякин И. А., Рыльцев Р. Е., Ремпель А. А.</b> .....	<b>74</b>
РАЗРАБОТКА МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ СПЛАВА TiZrHfNb МЕТОДАМИ ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ	
<b>Батурин В. С., Лепешкин С. В., Бушланова Н. А., Успенский Ю. А.</b> .....	<b>76</b>
СТРУКТУРА, СТАБИЛЬНОСТЬ И ЛОВУШКИ ЗАРЯДА В НАНОКЛАСТЕРАХ Cd <sub>n</sub> Se <sub>m</sub>	
<b>Беккер Т. Б., Литасов К. Д., Шацкий А. Ф., Крашенинников С. П.</b> .....	<b>77</b>
ВЛИЯНИЕ ФУГИТИВНОСТИ КИСЛОРОДА НА ФАЗООБРАЗОВАНИЕ В СИСТЕМЕ Ti-Al-Zr-O	
<b>Билинский Ю. М., Арсеев П. И.</b> .....	<b>78</b>
РАЗЛОЖЕНИЕ ГИЗБУРГА-ЛАНДАУ ДЛЯ МНОГОЗОННЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ	
<b>Волкова З. Н., Геращенко А. П., Верховский С. В., Михалев К. Н., Гермов А. Ю.</b> .....	<b>80</b>
ПЕРЕХОД ОРБИТАЛЬНЫЙ ПОРЯДОК – ОРБИТАЛЬНЫЙ БЕСПОРЯДОК В LaMnO <sub>3</sub> ПО ДАННЫМ ЯМР <sup>17</sup> O и <sup>139</sup> La	
<b>Волосников Д. В., Поволоцкий И. И., Васин М. Г., Сон Л. Д., Скрипов П. В.</b> .....	<b>82</b>
ТЕПЛООБМЕН В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПРОПИЛЕНГЛИКОЛЕЙ И ПОЛИПРОПИЛЕНГЛИКОЛЕЙ: ИМПУЛЬСНЫЙ ПЕРЕГРЕВ И СПИНОДАЛЬНЫЙ РАСПАД	

<b><u>Гаврюшкин П. Н., Литасов К. Д.</u>.....</b>	<b>84</b>
ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В $\text{CaCO}_3$ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ	
<b><u>Гайдук Е. А., Рыжов В. Н., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.</u>.....</b>	<b>86</b>
МНОГОКРАТНОЕ ВОЗВРАТНОЕ ПЛАВЛЕНИЕ В ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЕ СФЕР ГЕРЦА С ЕДИНСТВЕННОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗОЙ	
<b><u>Галимзянов Б. Н., Яруллин Д. Т., Мокшин А. В.</u>.....</b>	<b>87</b>
ПРЯМАЯ ОЦЕНКА КИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ ЖИДКОСТЯХ	
<b><u>Гудин С. А., Солин Н. И.</u>.....</b>	<b>89</b>
АНОМАЛЬНОЕ ИЗМЕНЕНИЕ РАЗМЕРА СПИНОВОГО ПОЛЯРОНА В ПАРАМАГНИТНОЙ ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР В ДВОЙНОМ ПЕРОВСКИТЕ $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$	
<b><u>Данилов И. В., Громницкая Е. Л., Циок О. Б., Бражкин В. В.</u>.....</b>	<b>91</b>
ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ГАЛОГЕНИДАХ АДАМАНТАНА ПОД ДАВЛЕНИЕМ	
<b><u>Дворецкая Е. В., Коплак О. В., Колмаков А.О.</u>.....</b>	<b>93</b>
МАГНИТНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В МИКРОПРОВОДАХ $\alpha\text{-Fe/PrDy-FeCo-B}$	
<b><u>Ефимченко В. С., Мелетов К. П., Федотов В. К., Барковский Н. В., Прокошин А. В.</u>.....</b>	<b>95</b>
УСТОЙЧИВОСТЬ СИЛИКАТОВ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ ВОДОРОДА И СОЗДАНИЕ ГИДРИДОВ НОВОГО ТИПА	
<b><u>Захарова Е.В., Демишев С.В.</u>.....</b>	<b>97</b>
ОПЫТ ОРГАНИЗАЦИОННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СЕКТОРА ОЦЕНКИ И РАЗВИТИЯ ИОФ РАН ПО УЧЁТУ И ПОВЫШЕНИЮ КВАЛИФИКАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАУЧНЫХ РАБОТНИКОВ	

<b><u>Зибров И.П., Филоненко В.П.</u>.....</b>	<b>99</b>
СТРУКТУРА НОВОЙ МОДИФИКАЦИИ D-Yb <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	
<b><u>Камаева Л. В., Стерхова И. В., Рыльцев Р. Е., Щелкачев Н. М.</u> .....</b>	<b>101</b>
ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ МЕДИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ТРОЙНЫХ РАСПЛАВОВ Al-Cu С Fe, Co И Ni	
<b><u>Кешарпу К. К., Григорьев П. Д.</u>.....</b>	<b>102</b>
АНИЗОТРОПИЯ ПРОВОДИМОСТИ НАД КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРОЙ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ НЕОДНОРОДНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ	
<b><u>Кирова Е. М., Писарев В. В.</u> .....</b>	<b>103</b>
МЕХАНИЗМЫ НУКЛЕАЦИИ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ	
<b><u>Колесникова А. С., Мазепа М. М.</u> .....</b>	<b>104</b>
МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА КОЛОННЫЙ ГРАФЕН: ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ КОНФИГУРАЦИИ	
<b><u>Копасов А. А., Кутлин А. Г., Мельников А. С.</u>.....</b>	<b>105</b>
ОСОБЕННОСТИ АНОМАЛЬНОГО ЭФФЕКТА ДЖОЗЕФСОНА В ИСКРИВЛЕННЫХ МАЙОРАНОВСКИХ НАНОПРОВОДАХ	
<b><u>Коплак О. В., Дворецкая Е. В., Шашков И. В., Сидоров В. Л., Моргунов Р. Б.</u>.....</b>	<b>107</b>
ЛАЗЕРНАЯ И МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДУЛЯЦИЯ ОБМЕННОГО СМЕЩЕНИЯ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ РАССЕЯНИЯ В МИКРОПРОВОДАХ НА ОСНОВЕ 3D И 4F МЕТАЛЛОВ	
<b><u>Королева Е. Ю., Гасяк Т.К., Вахрушев С.Б.</u> .....</b>	<b>109</b>
Е-Т ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА КЕРАМИК PMN-PT	
<b><u>Корсакова С. А., Яковлев Е. В., Юрченко С. О.</u> .....</b>	<b>111</b>
ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИЙ И ПЛАВЛЕНИЕ В ДВУМЕРНЫХ КОЛЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ	

<b><u>Красиков К. М., Глушков В. В., Демишев С. В., Богач А. В., Шицевалова Н. Ю., Филипов В. Б., Гаврилкин С. Ю., Случанко Н. Е.</u></b> .....	<b>112</b>
МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ И АНИЗОТРОПИЯ РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ В $\text{ErV}_{12}$	
<b><u>Краснорусский В. Н., Богач А. В., Кузнецов А. В., Шицевалова Н. Ю., Глушков В. В.</u></b> .....	<b>114</b>
АНОМАЛЬНЫЙ МАГНЕТИЗМ В $\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{V}_6$	
<b><u>Крючков Н. П., Яковлев Е. В., Юрченко С. О.</u></b> .....	<b>116</b>
ПРОВЕРКА МЕТОДА КРАТЧАЙШИХ ГРАФОВ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ С КИНЕТИЧЕСКИМ УРОВНЕМ РАЗРЕШЕНИЯ	
<b>Кузовников М. А.</b> .....	<b>118</b>
СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ ПРИ 250 К В ГЦК- $\text{LaH}_{10}$	
<b>Борик М. А., Колотыгин В. А., Кораблёва Г. М., <u>Кулебякин А. В.</u>, Курицына И. Е., Ломонова Е. Е., Мызина В. А., Рябочкина П. А., Табачкова Н. Ю., Волкова Т. В.</b> .....	<b>120</b>
ФАЗОВАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ СОЛЕГИРОВАННЫХ ОКСИДОМ СКАНДИЯ И ИТТЕРБИЯ	
<b><u>Кушнир И. А., Яковлев Е. В., Юрченко С. О.</u></b> .....	<b>121</b>
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПИННИНГА НА ДИНАМИКУ В 2D СИСТЕМЕ КОЛЛОИДНОЙ СУСПЕНЗИИ ВО ВНЕШНЕМ ВРАЩАЮЩЕМСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ	
<b><u>Лепешкин С. В., Батурин В. С., Успенский Ю. А., Оганов А. Р.</u></b> .....	<b>123</b>
ПРЕДСКАЗАНИЕ СТРУКТУРЫ И СТАБИЛЬНОСТИ НАНОКЛАСТЕРОВ С ПЕРЕМЕННЫМ СОСТАВОМ	
<b><u>Либет П. А., Яковлев Е. В., Юрченко С. О.</u></b> .....	<b>124</b>
РАСЧЁТ УСТАНОВКИ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ МЕЖДУ ЧАСТИЦАМИ В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ	

- Либет П. А., Яковлев Е. В., Юрченко С. О...... 126**  
 РОЛЬ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В  
 САМОСБОРКЕ МЯГКИХ КОЛЛОИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ  
 С РЕГУЛИРУЕМЫМ МЕЖЧАСТИЧНЫМ  
 ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ
- Максимова О. А., Лященко С. А., Овчинников С. Г. ..... 128**  
 ОБРАБОТКА МАГНИТОЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИХ  
 ДАННЫХ ДЛЯ ОБРАЗЦОВ FE/SiO<sub>2</sub>/Si РАЗЛИЧНОЙ  
 ТОЛЩИНЫ
- Мартьянов А. К., Седов В. С., Кузнецов С. В., Каменских И. А.,  
 Ральченко В. Г...... 130**  
 РЕНТГЕНОВСКОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ  
 SiV ЦЕНТРОВ В КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНКАХ АЛМАЗ-  
 YAG:Ce
- Меньшикова С. Г., Бражкин В. В., Суслов А. А., Ладьянов В. И.,  
 Черепанов П. Ф. ..... 132**  
 ФАЗЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ В ЭВТЕКТИЧЕСКИХ  
 СПЛАВАХ Al<sub>90</sub>Y<sub>10</sub>, Al<sub>86</sub>Ni<sub>6</sub>Gd<sub>4</sub>Tb<sub>2</sub>Er<sub>2</sub>
- Мирзиярова Д. А., Мокшин А. В. ..... 134**  
 ОБЩЕЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЩЕЛОЧНЫХ  
 МЕТАЛЛОВ ВБЛИЗИ ЛИНИИ НАСЫЩЕНИЯ
- Мионов С. В., Буздин А. И...... 136**  
 НАКАЧКА МАГНИТНОГО ПОТОКА В  
 СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ КОЛЬЦЕ С  
 ДЖОЗЕФСОНОВСКИМ Ψ-КОНТАКТОМ
- Мистрюкова Л. А., Крючков Н. П., Юрченко С. О...... 137**  
 ОПИСАНИЕ ПАРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В НИКЕЛЕ И МЕДИ  
 ПРИ ПОМОЩИ ОБОБЩЕННОГО МЕТОДА  
 КРАТЧАЙШИХ ГРАФОВ
- Могилюк Т. И., Григорьев П. Д...... 139**  
 МЕЖСЛОЕВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В УГЛАХ ЯМАДЖИ В  
 СЛОИСТЫХ МЕТАЛЛАХ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

<b><u>Наумова А. С., Лепёшкин С. В., Оганов А. Р.</u>.....</b>	<b>140</b>
УГЛЕВОДОРОДЫ ПОД ДАВЛЕНИЕМ: ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И НОВЫЕ СОЕДИНЕНИЯ	
<b><u>Обжиров А. Е., Саитов И. М.</u>.....</b>	<b>141</b>
ВЛИЯНИЕ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ НА ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДОГО ВОДОРОДА	
<b>Палюлин В. В.</b> .....	<b>143</b>
ПРЕДСКАЗАНИЕ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ СТЕКОЛ С ПОМОЩЬЮ НЕАФИННОГО ПОДХОДА	
<b>Писарев В. В.</b> .....	<b>146</b>
МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ЖИДКОСТЕЙ ПРИ СТЕКЛОВАНИИ	
<b><u>Путилов А. В., Миронов С. В.</u> .....</b>	<b>148</b>
ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ПЛАНАРНЫХ СТРУКТУР СВЕРХПРОВОДНИК–ФЕРРОМАГНЕТИК СО СПИН- ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ	
<b><u>Сагатов Н. Е., Сагатова Д. Н., Гаврюшкин П. Н., Литасов К. Д.</u> .....</b>	<b>150</b>
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НИТРИДОВ ЖЕЛЕЗА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ	
<b><u>Сагатова Д. Н., Гаврюшкин П. Н., Сагатов Н. Е., Шацкий А. Ф., Литасов К. Д.</u> .....</b>	<b>151</b>
ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ФАЗОВЫХ СООТНОШЕНИЙ В СИСТЕМЕ ОКСИД-КАРБОНАТ ЩЕЛОЧНО-ЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ	
<b>Саитов И. М.</b> .....	<b>153</b>
ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ И МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ	



<b>Самарин А. Н.</b> .....	<b>155</b>
АВТОМАТИЗАЦИЯ УЧЕТА ПУБЛИКАЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ: ОБЗОР ВОЗМОЖНОСТЕЙ НАУЧНЫХ БАЗ ДАННЫХ И СЕРВИСОВ	
<b>Самохвалов А. В., Robinson J. W. A., Буздин А. И.</b> .....	<b>157</b>
СПОНТАННЫЕ ТОКИ В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ КОЛЬЦЕ СО СПИРАЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ ТЕКСТУРОЙ	
<b>Стерхова И. В., Камаева Л. В., Ладьянов В. И., Щелкачев Н. М.</b> .....	<b>159</b>
ВЯЗКОСТЬ ОБЪЕМНО-АМОРФИЗУЮЩИХСЯ РАСПЛАВОВ (Fe <sub>0.75</sub> B <sub>0.15</sub> Si <sub>0.1</sub> )-(Nb,Ta)	
<b>Тихановский А. Ю., Мухин А. А., Иванов В. Ю., Кузьменко А. М.</b> .....	<b>161</b>
СИММЕТРИЙНЫЙ АНАЛИЗ ЭВОЛЮЦИИ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ И МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В Fe-ЛАНГАСИТАХ	
<b>Упоров С. А., Эстемирова С. Х., Быков В. А., Рыльцев Р. Е., Стерхов Е. В., Замятин Д. А.</b> .....	<b>163</b>
ТЕРМИЧЕСКИ СТАБИЛЬНЫЙ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЙ СПЛАВ ScTiZrHf С ГПУ СТРУКТУРОЙ	
<b>Файрушин И. И., Мокшин А. В.</b> .....	<b>164</b>
ОПИСАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЖИДКОСТИ ЮКАВЫ НА ОСНОВЕ АНАЛИТИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ РАДИАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ	
<b>Федоров И. Д., Стегайлов В. В.</b> .....	<b>165</b>
НЕАДИАБАТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ И ЭКСИТОНОПОДОБНЫЕ СОСТОЯНИЯ ПРИ НАГРЕВЕ ПЛОТНОГО ФЛЮИДА ВОДОРОДА	
<b>Филоненко В. П., Анохин А. С., Ткаченко В. В.</b> .....	<b>166</b>
ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА В СВЕРХТВЕРДЫХ КОМПОЗИТАХ	

<b>Норман Г. Э., Писарев В. В., Флейта Д. Ю.....</b>	<b>168</b>
КОЛЛЕКТИВНЫЕ ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ В ЖИДКОСТЯХ, АМОΡФНЫХ И ТВЁРДЫХ ТЕЛАХ	
<b><u>Хабибуллин Р. А., Мокшин А. В.....</u></b>	<b>170</b>
ВОССОЗДАНИЕ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПО СТРУКТУРЕ НА ОСНОВЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ	
<b><u>Хуснутдинов Р. М., Мокшин А. В. ....</u></b>	<b>171</b>
УПРУГИЕ СВОЙСТВА И СТЕКЛОФОРМИРУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ	
<b><u>Шустин М. С., Аксенов С. В.....</u></b>	<b>173</b>
МАГНЕТОКАЛОРИЧЕСКИЕ АНОМАЛИИ КАК ИНДИКАТОР ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ НАНОПРОВОЛОКАХ С СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ	
<b><u>Шутикова М. И., Стегайлов В. В. ....</u></b>	<b>174</b>
СВОЙСТВА КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ МАГНЕТИТА: РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ В МОДЕЛИ DFT+U	
<b>Филоненко В. П., Баграмов Р. Х., Зибров И. П., <u>Энкович П. В. ....</u></b>	<b>175</b>
ВЛИЯНИЕ БОРА НА СТРУКТУРУ ГРАФИТА, ФОРМИРУЮЩУЮСЯ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ	
<b><u>Юнусов М. Б., Хуснутдинов Р. М., Мокшин А. В.....</u></b>	<b>177</b>
ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЛАТРАТНЫХ ГИДРАТОВ	

# **ЛЕКЦИИ**



# ГИДРОДИНАМИКА ВЯЗКОЙ ДВУМЕРНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ЖИДКОСТИ

Алексеев П. С.

*ФТИ им. А. Ф. Иоффе, С.-Петербург*

*pavel.alekseev@mail.ioffe.ru*

В проводниках с малой плотностью дефектов межэлектронные столкновения могут приводить при низких температурах к формированию вязкой электронной жидкости. Недавно были обнаружены яркие свидетельства наличия такой жидкости в графене, в вейлевских полуметаллах, в высокоподвижных квантовых ямах на основе GaAs (см. ссылки в [1-6]).

Одним из таких свидетельств является эффект гигантского отрицательного магнетосопротивления. Действительно, явление вязкости представляет собой диффузный перенос среднего импульса частиц жидкости за счёт их свободного движения в промежутках между столкновениями. Для случая электронной жидкости магнитное поле искривляет траектории частиц и сильно сокращает эффективную длину переноса импульса, вследствие чего вязкость электронной жидкости и пропорциональное ей гидродинамическое сопротивление сильно падают с магнитным полем. Расчёты показывают, что такой механизм хорошо объясняет зависящую от температуры часть гигантского отрицательного магнетосопротивления [1].

В недавних экспериментальных работах сообщалось, что в GaAs квантовых ямах высокого качества часто присутствуют макроскопические овальные дефекты. Неоднородное распределения этих дефектов по образцу может приводить к сосуществованию в одном образце областей двух следующих типов [2]. В областях, где дефекты почти отсутствуют, доминируют межэлектронные столкновения, и реализуется описанный выше гидродинамический режим транспорта. В областях, где концентрация дефектов высока, электроны сталкиваются чаще всего с границами макроскопических дефектов и поэтому реализуется баллистический режим транспорта. В связи с этим был теоретически изучен магнетотранспорт взаимодействующих двумерных электронов в баллистическом режиме [2]. Обнаружено, что влияние слабого магнитного поля на траектории частиц, сталкивающихся преимущественно с краями баллистической области, приводит к температурно-независимому отрицательному магнетосопротивлению. Оценки величины этого

эффекта для GaAs квантовых ям показывают, что такой механизм, по-видимому, ответственен за не зависящую от температуры часть гигантского отрицательного магнетосопротивления [2]. Показано также, что холловское сопротивление в баллистическом режиме в малых магнитных полях близко к половине своего обычного значения в омическом режиме при низкой температуре [3].

В фотосопротивлении высокоподвижных GaAs квантовых ям в магнитном поле был обнаружен гигантский пик на частоте излучения, близкой к удвоенной циклотронной частоте электронов. Для объяснения этого эффекта была построена теория высокочастотного магнетотранспорта в вязкой двумерной электронной жидкости [4-6]. Показано, что коэффициенты вязкости электронов имеют резонанс на частоте излучения, равной удвоенной циклотронной частоте. Физическая природа этого резонанса состоит во вращении тензора вязких напряжений заряженной жидкости в магнитном поле с удвоенной циклотронной частотой [4]. В достаточно широких образцах резонанс может проявляться в затухании магнетоплазмонов [4], а в достаточно узких – в возбуждении волн поперечного нулевого магнитозвука [5]. В рамках теории ферми-жидкости Ландау показано, что циклотронная частота в коэффициентах вязкости перенормируется электрон-электронным взаимодействием и становится отличной от обычной циклотронной частоты, которая определяет циклотронный резонанс [6]. Последний результат, в частности, показывает, что предсказанный «вязкоупругий» резонанс вблизи удвоенной циклотронной частоты в отклике электронной жидкости даёт информацию о силе межэлектронного взаимодействия. На основе полученных теоретических результатов даны свидетельства в пользу того, что гигантский пик, наблюдаемый в фотосопротивлении высокоподвижных GaAs квантовых ям, представляет собой проявление вязкоупругого резонанса.

Исследования выполнены при поддержке грантов РФФИ (№ 20-12-18019, 18-72-10111) и РНФ (№ 19-02-00999, 18-02-01016).

#### Литература

1. P. S. Alekseev, Phys. Rev. Lett., **117**, 166601, **2016**
2. P. S. Alekseev, M. A. Semina, Phys. Rev. B, **98**, 165412, **2018**
3. P. S. Alekseev, M. A. Semina, Phys. Rev. B, **100**, 125419, **2019**
4. P. S. Alekseev, Phys. Rev. B, **98**, 165440, **2018**
5. P. S. Alekseev, A. P. Alekseeva, Phys. Rev. Lett., **123**, 236801, **2019**
6. П.С. Алексеев, ФТП, **53**, 1405, **2019**

## **«КВАНТОВЫЕ» ЗНАЧЕНИЯ «КЛАССИЧЕСКИХ» ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН**

Бражкин В. В.

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

Такие «квантовые» комбинации как Ридберг или Боровский радиус известны уже свыше 100 лет. Менее известны такие величины как «квантовое» давление (300 Мбар). В докладе будут обсуждаться границы применимости «квантовых» подходов при вычислении классических физических величин, таких как динамическая и кинематическая вязкость, скорость звука, теплопроводность и температуропроводность. Оказывается, что простые универсальные комбинации мировых констант (постоянная Планка, массы протона и электрона, постоянная тонкой структуры, скорость света) дают универсальные минимальные или максимальные значения скорости звука, кинематической вязкости и температуропроводности конденсированных сред. Более того, оказывается, что для кинематической вязкости всех флюидов существует уникальная точка на  $P, T$ -диаграмме соответствующая универсальному минимальному значению. Интересно, что в последние годы поиск похожих универсальных соотношений ведется для таких экзотических объектов как квазидвумерные электронные жидкости, адронная материя, черные дыры и т.д. В тоже время, оказывается, что концепция Планковского времени релаксации может дать много новой полезной информации и для, казалось бы, всесторонне изученных конденсированных сред.



## **КРИТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ПЕРЕХОДА БЕРЕЗИНСКОГО-КОСТЕРЛИЦА-ТАУЛЕСА**

Васин М. Г.

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

*dr\_vasin@mail.ru*

Рассмотрена неравновесная динамика фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулеса в представлении модели Синус-Гордона, с использованием техники Келдыша-Швингера и методов ренормгруппового анализа. Показано, что в высокотемпературном пределе результаты рассмотренной динамической теории согласуются с известными результатами стационарного подхода. Обсуждается отклонение критического поведения системы от «канонического» в квантовом пределе, при уменьшении разупорядочивающего действия ослабевающих тепловых флуктуаций  $T \rightarrow 0$ . Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-02-00643 а.

## **ОБМЕННОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ И АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В $\text{EuB}_6$**

Глушков В. В.

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

*Москва, Россия*

*glushkov@lt.gpi.ru*

Наличие двух последовательных – электронного ( $T_M \approx 16$  К) и магнитного ( $T_c \approx 14$  К) – фазовых переходов и связанных с ними аномалий транспортных и тепловых свойств, включающих эффект колоссального магнитосопротивления (КМС) – до 90 % в поле  $\sim 8$  Тл, определяет интерес к выяснению механизмов обменного взаимодействия между локализованными магнитными моментами 4f-оболочки ионов  $\text{Eu}^{2+}$  и 5d-электронами зоны проводимости в ферромагнитном полуметалле  $\text{EuB}_6$  [1-6]. Сам эффект КМС в  $\text{EuB}_6$  принято связывать с формированием магнитных поляронов в условиях обменного взаимодействия за счет локального спинового расщепления зоны проводимости и поляризации носителей заряда в ферромагнитной фазе гексаборида европия. Однако, несмотря на то, что степень спиновой поляризации в  $\text{EuB}_6$  не превышает 56% [6], данные резонансной неупругой рентгеновской спектроскопии (RIXS)

и расчеты зонной структуры гексаборида европия указывают на реализацию состояния с полностью поляризованными носителями заряда (half-metallic state) [5]. В такой ситуации дополнительную информацию о величине обменного взаимодействия и характере спинового расщепления зон в  $\text{EuB}_6$  можно получить из исследований квантовых осцилляций.

В работе обсуждаются транспортные (удельное сопротивление и эффект Холла) и магнитные свойства монокристаллических образцов  $\text{EuB}_6$ , измеренные в диапазоне температур 1,8–300 К в магнитных полях до 8 Тл. Исследуемые монокристаллы  $\text{EuB}_6$  выращены в Институте проблем материаловедения ПМ НАНУ методом зонной плавки в атмосфере инертного газа. Для образца  $\text{EuB}_6$ , выращенного с одним проходом зоны, на полевых зависимостях удельного сопротивления в магнитном поле выше 2,5 Тл наблюдались квантовые осцилляции Шубникова – де Гааза. Из частоты осцилляций 29,4 Тл оценены площади сечения поверхности Ферми  $S \approx 2,78 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$  и волнового вектора  $k_f \approx 2,97 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$ , отвечающие концентрации носителей заряда  $n_0 \approx 1,33 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  в приближении изотропной поверхности Ферми с учетом трехкратного вырождения зоны проводимости в точках X зоны Бриллюэна. Оценка эффективной массы  $m_{\text{eff}} \approx 0,19m_0$  ( $m_0$  – масса электрона) согласуется со значениями, ранее полученными для электронов проводимости из температурной зависимости коэффициента термоэдс [8]. При этом значение подвижности  $\mu \approx 1720 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ , рассчитанное из времени релаксации носителей заряда  $\tau \approx 0,186 \text{ пс}$ , хорошо коррелирует с величиной холловской подвижности электронов проводимости в ферромагнитной фазе  $\text{EuB}_6$  [3, 6].

Оценки параметров носителей заряда позволяют предположить, что носители заряда, определяющие квантовые осцилляции удельного сопротивления в ферромагнитной фазе  $\text{EuB}_6$ , отвечают состояниям подзоны электронов со спинами, поляризованными противоположно направлению магнитного поля ( $n_{\downarrow} = n_0$ ). Из значения холловской концентрации  $n_H \approx 3,57 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  можно оценить концентрацию электронов со спином, поляризованным по полю,  $n_{\uparrow} = n_H - n_{\downarrow} \approx 3,44 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ . Степень спиновой поляризации  $P = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})/n_H \approx 92 \%$  недостаточна для реализации полностью спин-поляризованного (half-metallic) состояния в ферромагнитной фазе  $\text{EuB}_6$  не реализуется. В свою очередь, оценка энергии обменного взаимодействия дает значение  $J \approx 70 \text{ мэВ}$ , согласующееся с литературными данными [6, 8].

В работе также обсуждаются механизмы усиления аномального эффекта Холла в разбавленных твердых растворах замещения на основе  $\text{EuV}_6$ , связанные с эффектами беспорядка и фрустрации обменного взаимодействия.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ (№18-02-01152). Автор благодарен В. С. Журкину, М. А. Анисимову, А. В. Богачу, А. Д. Божко, Н. Ю. Шицеваловой, Н. Е. Случанко и С. В. Демишеву за совместные эксперименты и обсуждение результатов.

#### Литература

1. J. Etourneau, P. Hagenmuller, *Phil. Mag. B*, **52**, 589, **1985**
2. S. Süllow et al., *Phys. Rev. B*, **57**, 5860, **1998**
3. В. В. Глушков и др., *ЖЭТФ*, **132**, 150, **2006**
4. U. Yu, B. I. Min, *Phys. Rev. B*, **74**, 094413, **2006**
5. J. Kim et al., *Phys. Rev. B*, **87**, 155104, **2013**
6. Z. Xiaohang et al., *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 167001, **2008**
7. V. Glushkov, et al., *Phys. Stat. Sol. (b)*, **250**, 618, **2013**
8. V. Glushkov et al., *Phys. Stat. Sol. (b)*, **254**, 1600571, **2016**

### **ЭФФЕКТИВНЫЙ G-ФАКТОР ЭЛЕКТРОНОВ, ИЗМЕРЯЕМЫЙ ПО МАГНИТНЫМ КВАНТОВЫМ ОСЦИЛЛЯЦИЯМ В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛАХ**

Григорьев П. Д.<sup>1,2,3</sup>, Рамазашвили Р.<sup>4</sup>, Карцовник М. В.<sup>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>*Laboratoire de Physique Theorique, Universite de Toulouse,  
CNRS, UPS, France*

<sup>5</sup>*Walther-Meißner-Institut, D-85748 Garching, Germany.*

Используя симметричные аргументы, мы показываем [1], что во многих металлах с антиферромагнитным упорядочением эффективный g-фактор носителей заряда, измеренный по магнитным квантовым осцилляциям, равен нулю. Экспериментальное исследование этого эффекта проводится в нескольких соединениях и сравнивается с предложенной теорией. Мы обнаружили, что антиферромагнитное состояние слоистого органического проводника

$\kappa$ -(BETS)<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub> не проявляет спиновой модуляции осцилляций Шубникова-де Гааза, в отличие от парамагнитного состояния того же материала. Это свидетельствует о вырождении уровней Ландау по спине, предсказанное для антиферромагнитных проводников. Аналогично, мы не находим спиновой модуляции в угловой зависимости медленных осцилляций Шубникова-де Гааза в оптимально легированном электронами купрате Nd<sub>2-x</sub>Ce<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub>. Это указывает на наличие неелевского порядка в этом сверхпроводнике даже при оптимальном легировании.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ №19-02-01000.

#### Литература

1. R. Ramazashvili, P.D. Grigoriev, T. Helm, F. Kollmannsberger, M. Kunz, W. Biberacher, E. Kampert, H. Fujiwara, A. Erb, J. Wosnitza, R. Gross, M.V. Kartsovnik, // arXiv:1908.01236.

## МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТОПОЛОГИЧЕСКОГО КОНДО ИЗОЛЯТОРА SmB<sub>6</sub> – НОВОЕ И ХОРОШО ЗАБЫТОЕ СТАРОЕ

Демишев С. В.

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН  
demis@lt.gpi.ru*

В докладе рассмотрена новая спин-поляронная концепция для описания низкотемпературных магнитных свойств поверхности топологического Кондо-изолятора SmB<sub>6</sub>. Экспериментально установлено, что (1) парамагнитные центры, обуславливающие статический и динамический магнитный отклик возникают пороговым образом при температурах ниже  $T^* \sim 5$  К [1]. (2) Данные центры обладают аномально большой величиной локализованного магнитного момента (ЛММ)  $\mu^* \sim (7-14)\mu_B$ , определенной из полевых зависимостей намагниченности [2]. (3) Парамагнитные центры характеризуются временем спиновой релаксации  $\tau \sim 10^{-8}$  с, которое не менее чем на 5 порядков превышает время зарядовых и спиновых флуктуаций иона Sm в состоянии однородной переменной валентности [3]. Для объяснения экспериментальных фактов, предложена модель, связывающая указанные особенности магнитных

свойств с формированием спинового полярона с антиферромагнитным взаимодействием между элементарными магнитными моментами [3,4]. Такие спиновые поляроны могут рассматриваться как ферромагнитные кластеры, содержащие  $n_1$  электронов с магнитным моментом  $\mu_1$  и  $n_2$  локализованных магнитных моментов (ЛММ) с магнитным моментом  $\mu_2$ . Число ЛММ и электронов в кластере определяется условием  $\mu_1^2 n_1 = \mu_2^2 n_2$ . Полевая зависимость намагниченности такой спиновой структуры ведет себя аналогично парамагнитному центру с увеличенным (по отношению к  $\mu_1$  и  $\mu_2$ ) эффективным магнитным моментом  $\mu^*$ . Динамические свойства такого кластера отвечают вращению намагниченности на одной частоте с  $g$ -фактором  $g \sim 2$  [4]. Парамагнитный отклик спинового кластера ( $\mu^* > 0$ ) возможен лишь в случае, когда момент подрешетки с большим элементарным магнитным моментом направлен противоположно направлению внешнего магнитного поля. При этом данная подрешетка содержит меньшее количество частиц, в связи с упоминавшимися условиями термодинамической стабильности. В рамках данной модели мы рассчитали зависимости  $\mu^*$  для различного числа электронов и ЛММ в спиновом кластере в предположении, что  $\mu_1 = \mu_B$ . Требование формирования парамагнитного отклика кластера ( $\mu^* > 0$ ) приводит к условиям  $n_1 = n_e$  и  $n_2 = n(Sm^{3+})$ , а максимизация эффективного момента дает  $n_e = n(Sm^{3+}) + 1$ . Здесь  $n_e$ ,  $n(Sm^{3+})$  означают число электронов и число ионов  $Sm^{3+}$  в спин-поляронном состоянии. Реалистичные значения  $\mu^*$ , отвечающие экспериментальным данным [2] могут соответствовать числам, сравнимым с количеством ионов  $Sm^{3+}$  в изолированной элементарной ячейке, т.е. спиновым кластерам наноразмера. Рассмотренные оценки дают возможность качественного объяснения низкотемпературного магнитного перехода в  $SmB_6$  с возникновением большого эффективного момента  $\mu^*$  и аномального времени спиновой релаксации. Спиновый кластер (спиновый полярон) может быть составлен из  $n(Sm^{3+})$  Кондо синглетов, связывающих один дополнительный электрон. Эти спиновые состояния могут сохраняться на поверхности образца в виде редкого исключения, в то время как большая часть Кондо синглетов распадается [3]. В режиме переменной валентности данная ситуация может возникать в результате «замораживания» возникающих в виде флуктуации таких спиновых состояний при достаточно низких температурах. Таким образом, температура перехода  $T^*$  будет соответствовать энергии связи спиновых поляронов. После формирования, в магнитном поле спиновый полярон ведет себя как

парамагнитный центр с существенно увеличенным эффективным магнитным моментом  $\mu^*$ , а также ему будет соответствовать магниторезонансная мода  $g$ -фактором  $\sim 2$ , в соответствии с экспериментом [1]. Многочастичная природа спин-поляронных состояний предполагает, что электронные переходы, обеспечивающие спиновую релаксацию с характерным временем  $\tau \sim 10^{-8}$  с будут возникать на временной шкале отличной от времени зарядовых флуктуаций. Формирование спиновых поляронов должно быть выгодно по энергии ниже  $T^*$ , что может реализовываться за счет локализации дополнительного электрона. Работа поддержана программой Президиума РАН «Фотонные технологии в зондировании неоднородных сред и биообъектов».

#### Литература

1. S.V. Demishev *et al.*, Scientific Reports, **8**, 7125, **2018**
2. S.V. Demishev *et al.*, JETP Lett., **109**, 150, **2019**
3. S.V. Demishev *et al.*, Applied Mag. Res., **51**, 71, **2020**
4. S.V. Demishev *et al.*, J. Low Temp. Phys., **41**, 971, **2015**

## КРАЕВЫЕ ФОТОТОКИ В ДВУМЕРНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Дурнев М. В.

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург  
*durnev@mail.ioffe.ru*

В докладе представлены результаты недавних теоретических и экспериментальных исследований краевого фототока, возникающего на границе двумерной кристаллической системы при освещении её переменным электромагнитным полем терагерцового диапазона. Возникающий электрический ток не зависит от времени, его амплитуда пропорциональна интенсивности падающей волны, а направление – поляризации. Краевые токи такого типа были измерены в графене в 2011 году [1], а впоследствии наблюдались в топологических изоляторах на основе квантовой ямы HgTe/CdHgTe [2] и совсем недавно – в двуслойном графене [3]. В докладе обсуждаются механизмы генерации краевого фототока как в проводящих системах, так и в изоляторах, в том числе – топологических [4]. Представлена микроскопическая теория эффекта

и получены аналитические выражения для краевого тока. Также рассмотрено влияние постоянного магнитного поля на величину и поляризационную зависимость тока, в том числе показано, что при приложении магнитного поля возникает циклотронный резонанс в краевом фототоке. С увеличением магнитного поля на краю двумерного электронного газа формируются киральные краевые состояния, ответственные за возникновение квантового эффекта Холла, и краевой фототок возникает вследствие поглощения терагерцового излучения в проводящих краевых каналах [5]. Терагерцовая спектроскопия киральных электронов в этом случае позволяет определить их важные параметры, в том числе время релаксации.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 19-72-00029.

#### Литература

1. J. Karch et al., Phys. Rev. Lett., **107**, 276601, **2011**
2. К.-М. Dantscher et al., Phys. Rev. B, **95**, 201103 (R), **2017**
3. S. Candussio et al., arXiv: 2005.01407, **2020**
4. M.V. Durnev, S. A. Tarasenko, Ann. Phys., 1800418, **2019**
5. H. Plank et al., 2D Materials, **6**, 011002, **2019**

## **СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ С НЕТРИВИАЛЬНОЙ ТОПОЛОГИЕЙ, ИНДУЦИРОВАННОЙ СПИН-ОРБИТАЛЬНОЙ СВЯЗЬЮ И ГЕЛИКОИДАЛЬНЫМ СПИНОВЫМ УПОРЯДОЧЕНИЕМ, ПРИ УЧЕТЕ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ**

Злотников А. О., Аксенов С. В., Шустин М. С.

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

В работе рассмотрены твердотельные структуры, в которых может реализовываться топологическая сверхпроводимость с возбуждениями особого рода – майорановскими модами. К таким системам относятся: гибридные структуры [1], содержащие полупроводниковые материалы с сильным спин-орбитальным взаимодействием и обычные (нетопологические) сверхпроводники,



такие как нанопроволоки InAs или InSb, в контакте с нитридом ниобия-титана или алюминием [2, 3]. Представлены результаты рассмотрения сверхпроводящих систем с неколлинеарным, или геликоидальным магнитным упорядочением, включающие цепочку магнитных наночастиц, или атомов на сверхпроводящей подложке [4], а также магнитные сверхпроводники [5].

Одним из важнейших вопросов для систем с нетривиальной топологией является вопрос о влиянии кулоновского взаимодействия на топологическую классификацию и майорановские моды. Это направление исследований представляется актуальным, поскольку в ряде топологических сверхпроводящих системах реализуется режим сильных электронных корреляций [6].

При малой концентрации носителей заряда процессами квазичастичного затухания можно пренебречь даже в режиме сильных корреляций. Поэтому в этом случае формирование майорановских мод описывается аналитически на основе атомного представления. Такая ситуация характерна при реализации фазы сосуществования киральной сверхпроводимости и 120-градусного магнитного порядка (фаза СП+120) в системах с треугольной решеткой, таких как кобальтаты натрия [7]. При этом оказалось, что поправки от спин-зарядовых флуктуаций качественно меняют зависимость намагниченности от контрольного параметра.

Спин-зарядовые флуктуации имеют важное значение в сверхпроводящих нанопроволоках со спин-орбитальным взаимодействием [8]. В этом случае необходимо использовать методы, обеспечивающие выход за рамки беспетлевого приближения, либо методы, использующие компьютерное моделирование.

Нами в отмеченных направлениях были получены перечисленные ниже результаты, которые будут отражены в докладе:

1. Показана реализация майорановских мод в фазе СП+120 на треугольной решетке в режиме сильных электронных корреляций [7].
2. Определены условия реализации квантовых топологических переходов в фазе СП+120, проявляющиеся в изменении топологического инварианта, в изменении свойств краевых состояний, а также в появлении изломов в зависимости намагниченности от контрольного параметра.
3. Методом ренорм-группы для матрицы плотности проанализирован режим сильных электронных корреляций в сверхпроводящих нанопроволоках. Показано, что области

реализации одиночных и двойных майорановских мод на топологической фазовой диаграмме существенно уменьшаются по сравнению со случаем невзаимодействующих электронов [8].

4. Показан переход к тривиальной топологии сверхпроводящего состояния в нанопроволоке в пределе бесконечной величины кулоновского отталкивания.

Результаты получены при поддержке РФФИ, в рамках проектов № 19-02-00348, 19-42-240011, 20-32-70059. Один из авторов (С.В.А.) благодарит за поддержку Совет по грантам Президента РФ (проект МК-1641.2020.2).

#### Литература

1. J.D. Sau, R.M. Lutchyn et al., Phys. Rev. Lett., **104**, 040502, **2010**
2. V. Mourik, K. Zuo et al., Science, **336**, 1003, **2012**
3. H. Zhang, C.-X. Liu et al., Nature, **556**, 74, **2018**
4. T.-P. Choy, J. M. Edge et al., Phys. Rev. B, **84**, 195442, **2011**
5. I. Martin and A.F. Morpurgo, Phys. Rev. B, **85**, 144505, **2012**
6. Y. Sato, S. Matsuo et al., Phys. Rev. B, **99**, 155304, **2019**
7. В.В. Вальков, А.О. Злотников, Письма в ЖЭТФ **109**, 769, **2019**
8. S.V. Aksenov, A.O. Zlotnikov, M.S. Shustin, Phys. Rev. B, **101**, 125431, **2020**

## КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ КАК ЭЛЕМЕНТНАЯ БАЗА ДЛЯ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Капуткина Н. Е.<sup>1</sup>, Алтайский М. В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва*

<sup>2</sup>*Институт космических исследований РАН, г. Москва  
kaputkina@mail.ru, altaisky@rssi.ru*

Системы искусственного интеллекта могут использовать как алгоритмические, так и неалгоритмические методы машинного обучения. Быстродействие этих устройств ограничено как скоростью выполнения операций булевой алгебры (для классических устройств), так и минимальным размером логических элементов. Использование унитарной квантовой эволюции квантовых регистров вместо необратимых операций булевой алгебры является естественным

способом увеличения эффективности вычислений и машинного обучения за счет квантового параллелизма.

Квантовые точки перспективны в качестве элементной базы систем машинного обучения в связи с масштабируемостью технологии производства массивов квантовых точек, миниатюрностью отдельных элементов (менее 100 нм может быть размер отдельного кубита на КТ), низким энергопотреблением и отсутствием необходимости охлаждения до сверхнизких температур. Особенно значимо это в сравнении с использованием в качестве элементной базы сквидов и т. п. Приложение внешних полей дает возможность управлять параметрами отдельных квантовых точек (такими как спектр и характерная область локализации) и взаимодействием между различными КТ системы. Устанавливая оптические и электрические связи между КТ, можно контролировать корреляции 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 для достаточно высоких температур, порядка десятков градусов Кельвина. Проводились 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, в принципе, позволяет реализовать процедуру исключаящего ИЛИ, что не под силу классическому однослойному перцептрону. Используя различные конфигурации связей, можно получить различные классификации пространства квантовых состояний трехкубитового регистра, т. е. реализовать классификационную функцию квантовой нейронной сети.

#### 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.

## **ОПРЕДЕЛЕНИЕ МИКРОЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА СИНТЕТИЧЕСКОГО АЛМАЗА МЕТОДОМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ИНДУКТИВНО-СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМЫ С ФЕМТОСЕКУНДНОЙ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИЕЙ**

Литасов К. Д.

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

Исследование микроэлементного состава синтетических алмазов, выращенных при высоких давлениях и температурах в присутствии различных типов металлических катализаторов, важно как для контроля качества синтетического материала, определения особенностей роста монокристаллов, вариаций в составе среды кристаллизации, так и для установления критериев различия синтетических и природных алмазов, в ювелирном деле. В данной работе были исследованы несколько наборов синтетических алмазов различных промышленных производителей, а также наборы из архивных материалов ИФВД РАН.

Данные 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. Измеренные концентрации были пересчитаны на 100% углерода, который был измерен с использованием изотопа  $^{13}\text{C}$ . Минимальный уровень определяемых концентраций микроэлементов составляет 1 ppb.

Величины абсолютных концентраций микроэлементов в исследуемых алмазах не несут практической информации, поскольку

абляционное пятно покрывает область с переменным количеством металлических микровключений. Именно поэтому диапазон концентраций микроэлементов в алмазах, изученных, например, в работе [1] составляет не менее 6 порядков. Наиболее важной информацией, которая может быть получена из этих данных, являются элементные соотношения.

В результате исследования было установлено, что подавляющее большинство включений (зон включений) соответствует составу металла-катализатора. Редкие включения соответствуют преобладанию того или иного конечного члена. Также часто включения характеризуются высокими концентрациями Si. Были получены данные для Fe-Ni, Fe-Co, Mn-Ni, Mn-Ni-Co, и Mn-Ni-Fe составов. Следовательно, с помощью подобного анализа можно установить состав металла-катализатора в неизвестных алмазах, а при исследовании полированных алмазов – распределение примесей в разных ростовых зонах кристалла.

Наиболее важным оказались данные по алмазам с Ni-Mn-Co включениями. Среднее соотношение для 11 алмазов составляет Ni: Mn: Co = 66,6 : 28,6 : 4,8 мас.% [2]. Измеренные составы полностью соответствуют составам Ni-Mn-Co включений в алмазах из природных офиолитовых пород [1, 3-4] и НРНТ-катализатора Ni<sub>70</sub>Mn<sub>25</sub>Co<sub>5</sub> (мас.%), который наиболее широко используется для производства синтетических алмазов в Китае [5]. Следовательно, отмеченные алмазы, найденные в природе, являются ничем иным как загрязнением проб на этапе отбора или переработки. Представленные модели глубинного происхождения пород на основании находок алмазов с Ni-Mn-Co включениями не имеют под собой достаточных оснований. Таким образом, современные анализы микроэлементного состава алмаза позволяют однозначно идентифицировать синтетические образцы, даже если они найдены в удаленных природных обстановках.

#### Литература

1. D. Howell et al., *Earth Planet. Sci. Lett.*, **430**, 284, **2015**
2. K.D. Litasov et al., *High Pressure Res.*, **39**, 480, **2019**
3. J. Yang et al., *Gondwana Res.*, **27**, 459, **2015**
4. D. Lian et al., *Contrib. Mineral. Petrol.*, **173**, 72, **2018**
5. X. Tan, *JOM: J. Minerals Metals Mater. Soc.*, **66**, 2176, **2014**.

## ДИНАМИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Манцевич В. Н.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
vmantsev@gmail.com*

Идея контроля спиновой поляризации в полупроводниковых структурах малых размеров получила активное развитие в связи с тем, что современные технологические возможности позволили формировать низкоразмерные системы, состоящие из квантовой ямы и магнитного слоя, отделенного промежуточной буферной областью [1,2]. Такие гибридные системы открывают возможность для управления спиновой поляризацией в квантовой яме за счет присутствия магнитного слоя малой толщины, приводящего к спин-зависимому туннелированию между ямой и слоем. Одним из наиболее ярких экспериментальных подтверждений влияния магнитного слоя на состояние носителей в квантовой яме является наблюдение циркулярной поляризации фотолюминесценции, излучаемой из квантовой ямы, во внешнем магнитном поле [3]. Понимание физических принципов процессов, протекающих в гибридных системах 2D полупроводник – ферромагнетик (коррелированное примесное состояние) откроет возможности для применения таких систем и структур на их основе в полупроводниковой наноэлектронике.

Физическое явление, обсуждаемое в данной лекции, заключается в возникновении спиновой поляризации носителей заряда в квантовой яме за счет спин-зависимого туннелирования через туннельный канал между квантовой ямой и магнитным слоем. Такие процессы без учета наличия кулоновских корреляций в магнитном слое были подробно рассмотрены и описаны авторами работы [4]. Однако, для наиболее полного описания процессов динамической генерации спиновой поляризации в гибридных структурах требуется учет роли кулоновских корреляций, которые могут приводить к увеличению расщепления между спиновыми уровнями магнитного примесного состояния, что вызывает возрастание спиновой поляризации носителей заряда, остающихся в квантовой яме [5]. В данной лекции будут подробно обсуждены основные механизмы формирования неравновесной спиновой поляризации в двумерной системе и обусловленной ее наличием поляризации фотолюминесценции; будет

проанализирована модификация электронного спектра гибридной системы, происходящая в результате формирования состояний, отщепленных от края зоны в двумерной структуре; будет обсуждено влияние отщепленных состояний на динамику фотолюминесценции, детектируемой из квантовой ямы [6,7].

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант 18-72-10002) и РФФИ (грант 18-02-00057).

#### Литература

1. H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, Y. Iye. *Appl. Phys. Lett.*, **69** (3), 363, **1996**
2. T. Dietl, H. Ohno. *Rev. Mod. Phys.*, **86**, 187, **2014**
3. B.A. Aronzon, *et al.* *J. Appl. Phys.*, **107** (2), 023905, **2010**
4. I.V. Rozhansky, K.S. Denisov, N.S. Averkiev, I.A. Akimov, E. Lahderanta. *Phys. Rev. B*, **92**, 125428, **2015**
5. N.S. Maslova, I.V. Rozhansky, V.N. Mantsevich, P.I. Arseyev, N.S. Averkiev, E. Lahderanta, *Phys. Rev. B*, **97**, 195445, **2018**
6. V.N. Mantsevich, I.V. Rozhansky, N.S. Maslova, P.I. Arseyev, N.S. Averkiev, E. Lahderanta, *Phys. Rev. B*, **99**, 115307, **2019**
7. I.V. Rozhansky, V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, P.I. Arseyev, N.S. Averkiev, E. Lahderanta, *Phys. Rev. B*, **101**, 045305, **2020**

## ПЕРЕПУТАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ И КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ПОДСИСТЕМ ВО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУРАХ

Маслова Н. С.

*Центр квантовых технологий и кафедра квантовой электроники,  
физический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова,  
119991 Москва, Россия  
nsmaslova@gmail.com*

Формирование и временная эволюция перепутанных состояний являются одной из наиболее интересных проблем современной квантовой физики. Волновая функция перепутанного состояния квантовой системы, состоящей из нескольких подсистем, не может быть представлена в виде прямого произведения волновых функций каждой из подсистем (факторизована). В классической физике



взаимодействующие подсистемы становятся полностью независимыми после выключения взаимодействия между ними. В квантовом случае для перепутанных состояний корреляции между различными подсистемами сохраняются даже после выключения взаимодействия между ними. Перепутанные состояния представляют особый интерес для обеспечения секретности при передаче информации, задач телепортации, для создания различных логических устройств, а также для увеличения соотношения сигнал/шум в квантовой спектроскопии.

Современное развитие квантовых технологий требует интенсивного исследования временной эволюции перепутанных состояний после включения или выключения взаимодействия. Кроме того, в процессе временной эволюции при наличии «перепутанности» в одной из подсистем может формироваться особое состояние – «кот Шрёдингера» – представляющее собой квантовую суперпозицию хорошо определённых когерентных состояний. В частности, квантовая суперпозиция когерентных состояний одной из колебательных мод в системе взаимодействующих молекул может сформироваться в результате возникновения перепутанности между электронными и колебательными степенями свободы.

В квантовой оптике появление перепутанных состояний электронной и колебательной подсистем интенсивно исследовалось для атомов, находящихся в «ловушках» и взаимодействующих с внешним лазерным полем, переводящим электроны из основного в возбуждённое состояние. Перепутанные электронные и колебательные состояния в этом случае возникают из-за зависимости частоты Раби от положения атомов в «ловушке» [1]. Оказывается, что возникновение перепутанных состояний электронной и колебательной подсистем возможно также в связанных молекулах, помещённых между управляющими электродами, после включения взаимодействия между молекулами в начальный момент времени, в отсутствие внешнего лазерного поля.

В рамках адиабатической схемы электронные переходы между молекулами изменяют равновесную конфигурацию ионов [2], что приводит к «запутыванию» электронной и колебательной подсистем. При этом в ходе временной эволюции состояния колебательной моды одной из молекул могут иметь вид «кота Шрёдингера» и при этом быть запутанными с пустыми и однократно заполненными электронными состояниями. Степень перепутанности электронных и колебательных степеней свободы меняется в ходе временной

эволюции системы и определяется поведением электронно-колебательных корреляционных функций. Временная зависимость корреляционных функций после включения взаимодействия между молекулами проанализирована с помощью диаграммной техники Келдыша. Обнаружено, что в ходе временной эволюции в исследуемой системе происходит многократное переключение между перепутанными и неперепутанными состояниями. Появление перепутанных состояний может быть обнаружено в СТМ/СТС экспериментах по исследованию нестационарного туннельного тока, протекающего через отдельную молекулу.

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

#### Литература

1. C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, D. J. Wineland, *Science*, **272**, 1131, **1996**
2. P. I. Arseyev, N. S. Maslova, *Phys. Usp.*, **53**, 11, **2010**

## МОДЫ ХИГГСА В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СИСТЕМАХ

Мельников А. С.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт Физики микроструктур РАН,  
603950, Нижний Новгород, ГСП-105*

<sup>2</sup>*Sirius University of Science and Technology, 1 Olympic Ave,  
354340, Sochi, Russia  
melnikov@ipm.sci-nnov.ru*

В докладе будет представлен обзор современного состояния дел по экспериментальному и теоретическому исследованию 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. Теоретические работы по исследованию коллективных колебаний модуля параметра порядка в сверхпроводниках начались достаточно давно с пионерской работы А. Ф. Волкова и С. М. Когана [1], в которой с использованием техники Келдыша была описана низкотемпературная бесстолкновительная динамика сверхпроводников. В дальнейшем этот подход был

дополнен анализом на основе нестационарной теории Боголюбова–де Жена и с использованием аналогии задачи с моделью динамики псевдо-спинов [2]. В пределе нулевой температуры сверхпроводящая щель  $\Delta$  демонстрирует осцилляционное поведение, в асимптотике больших времен имеющим вид  $\Delta(t) \approx \Delta_\infty + a \cdot \cos(2\Delta_\infty t) / \sqrt{\Delta_\infty t}$ , где предельное значение  $\Delta_\infty$  совпадает с равновесным значением параметра порядка  $\Delta_0$  в случае слабого возмущения сверхпроводника и отлично от него, если сверхпроводник существенно выведен из равновесия. Развитие терагерцовой экспериментальной техники позволило напрямую пронаблюдать осцилляции сверхпроводящего параметра порядка с помощью pump-probe методики [3,4]. Широкополосная накачка возбуждает моду с частотой  $2\Delta_0$ , в то время как узкополосная накачка с хорошо определенной частотой  $\omega$  вызывает осцилляции модуля параметра порядка с частотой  $2\omega$ . Поскольку сверхпроводящий параметр порядка входит в материальное соотношение для сверхпроводника между током и сверхскоростью, возбуждение мод Хиггса приводит к нелинейному отклику на частоте третьей гармоники  $3\omega$ . Амплитуда нелинейного сигнала имеет пик при частоте совпадающей с собственной частотой мод Хиггса  $2\omega = 2\Delta_0$ , что подтверждается экспериментом и теоретическими расчетами.

Исследование динамики сверхпроводящих систем может быть важно в контексте идентификации типа сверхпроводящего спаривания различных естественных сверхпроводников, 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.

Работы поддержаны проектами РФФИ 19-31-51019 и 18-02-00390.

#### Литература

1. А.Ф.Волков, С.М.Коган, ЖЭТФ **65**, 2038 (1973).
2. E.A.Yuzbashyan et al., Phys.Rev.Lett. **96**, 097005 (2006).
3. R. Matsunaga et al., Phys. Rev. Lett. **111**, 057002 (2013).
4. R. Matsunaga et al. Science 345, 1145-1149(2014).

## ЗАПУТАННОСТЬ НЕТОЖДЕСТВЕННЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ

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,*

*mikheen@bk.ru*

Доклад является продолжением выступления на близкую тему на этой же конференции в 2016 году. Но тогда доклад был посвящен главным образом истории вопроса, основным представлениям теории квантовой запутанности и первым шагам на ее пути в физику конденсированного состояния.

На этот раз тема несколько иная.

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 таких систем [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 различные варианты модели возникают не только в породившей ее спин-орбитальной физике, но и в активно развивающейся сейчас области ультрахолодных атомов в ловушках [6].

Итак, методом точной диагонализации изучается запутанность двух подсистем для конечной одномерной цепочки с гамильтонианом

$$H = J \sum \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + I \sum \mathbf{T}_i \mathbf{T}_j + K \sum (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j)(\mathbf{T}_i \mathbf{T}_j),$$

где  $\mathbf{S}_i$  и  $\mathbf{T}_i$  – операторы спина и псевдоспина,  $S=1/2$ ,  $T=1/2$ , все суммы – по связям ближайших узлов. Кроме канонического вида, запутанность вычислялась также для вариантов модели, когда в слагаемом спин-псевдоспинового взаимодействия под суммой стоят выражения  $(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j)(\mathbf{T}_i^z \mathbf{T}_j^z)$ , или  $(S_i^z S_j^z)(T_i^z T_j^z)$ , или  $(S_i^a S_j^a T_i^a T_j^a)$ .

Для характеристики степени запутанности используется один из наиболее популярных критериев – вычисление Concurrence (к сожалению, перевода этого физического термина на русский пока нет, а буквальный перевод слова – «совпадение», «согласованность» – не

вполне адекватен). Но, разумеется, поскольку изначально вычисляется точная матрица плотности, может быть определен и любой другой критерий.

Во всех случаях вычисляется запутанность в нулевом внешнем поле (эти результаты для большинства указанных моделей уже известны, см. [7] и ссылки там), а также влияние на нее внешних полей.

Изучается случай как однонаправленных, так и разнонаправленных полей в обеих подсистемах (последнее здесь возможно в силу разной физической природы спина и псевдоспина). Для полноты изучен и вариант с шахматными полями в обеих подсистемах (и, между прочим, он приводит к весьма интересным и интуитивно неочевидным результатам).

Проводится сравнение с предыдущими (полуаналитическими) работами авторов.

Кроме того, предложен локальный критерий определения области запутанности, не требующий нахождения полной матрицы плотности (критерий эмпирический, строгого обоснования нет). Критерий позволяет без затрат существенных вычислительных ресурсов определить наиболее интересные для детального изучения области параметров.

Исследование выполнено при поддержке грантов РФФИ № 19-02-00509 и РНФ № 18-12-00438.

#### Литература

1. И. В. Баргатын, Б. А. Гришанин, В. Н. Задков, УФН, **171**, 625, **2001**
2. L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral, Rev. Mod. Phys., **80**, 517, **2008**
3. R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki, Rev. Mod. Phys., **81**, 865, **2009**
4. J. Eisert, M. Cramer, M. B. Plenio, Rev. Mod. Phys., **82**, 277, **2010**
5. К.И.Кугель, Д.И.Хомский, УФН, **136**, 621, **1982**
6. A. M. Belemuk, N. M. Chtchelkatchev, A. V. Mikheyenkov, and K. I. Kugel, Phys. Rev. B **96**, 094435, **2017**; New J. Phys. 20, 063039, **2018**
7. D. Gotfryd, E. M. Parschke, J. Chaloupka, A. M. Oles, and K. Wohlfeld, Phys. Rev. R **2**, 013353, **2020**
8. М. Ю. Каган, К. И. Кугель, А. В. Михеенков, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ, **100**, 207, **2014**
9. В.Э. Валиулин, А. В. Михеенков, К.И. Кугель А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ, **109**, 557, **2019**

## МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В РЕШЕНИИ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧ И НЕ ТОЛЬКО...

Мокшин А. В.<sup>1</sup>, Хабибуллин Р. А.<sup>1</sup>, Мирзиярова Д. А.<sup>1</sup>,  
Мокшин В. В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, г. Казань

<sup>2</sup>Казанский Национальный Технический Университет

(КНИТУ-КАИ), г. Казань

*anatolii.mokshin@mail.ru*

Многие хорошо известные физические задачи считались и до сих пор считаются *нерешаемыми* по вполне понятным причинам. Так, например, имеющиеся исходные условия в этих задачах могут быть сформулированными очень широко, либо этих условий не совсем достаточно, чтобы получить решение стандартными математическими методами. Единственный способ найти решение в подобного рода задачах – это осуществление перебора возможных решений, что является очень трудоемким и поэтому совершенно не рассматривается в качестве подходящего метода.

С другой стороны, решения этих задач могут быть получены с помощью так называемых *методов машинного обучения*, к которым относятся методы нейронных сетей, эволюционных (генетических) алгоритмов и др. Хорошо известными физическими задачами, решения которых уже предлагались и были получены с помощью методов машинного обучения являются задачи на «предсказание» кристаллических фаз (при экстремальных давлениях, специфических условиях геометрий системы: квазидвумерные системы, системы в конфайнменте и т.д.). Кроме того, методы машинного обучения позволяют решать задачи, связанные с воссозданием эффективных потенциалов межчастичного взаимодействия по экспериментальным данным о структуре. Обсуждению этих и других результатов посвящен данный доклад.

Работа выполнена при поддержке грантов Российского научного фонда (проект № 19-12-00022) и РФФИ 18-02-00407.

# ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ МОДЕЛЯХ ПОТТСА

Муртазаев А. К.<sup>1</sup>, Бабаев А. Б.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН,  
Махачкала, 367010 Россия*

<sup>2</sup>*Дагестанский государственный педагогический университет,  
Махачкала, 367000 Россия*

Изучение фазовых переходов и связанных с ними критических явлений традиционно привлекают к себе внимание физиков. Неидеальные черты, присущие реальным системам, оказывают значительное влияние на магнитные и тепловые свойства рассматриваемых систем. В частности, присутствие немагнитных примесей может изменить род фазового перехода, и эта проблема остается актуальной в течение последних двадцати лет [1, 2]. В настоящей работе на основе методов Монте-Карло исследовано влияние слабого беспорядка, реализованного в виде замороженных немагнитных примесей, на фазовые переходы в двумерных системах, описываемых моделями Поттса.

Гамильтониан спиновой системы, описываемой моделью Поттса с числом состояний спина  $q$ , имеет следующий вид:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

где  $\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$  и  $\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена примесь.} \end{cases}$

Изучены термодинамические свойства моделей Поттса в зависимости от концентрации немагнитных примесей. Показано, что внесение замороженного беспорядка в виде немагнитных примесей каноническим способом в рассматриваемые модели приводят к фазовому переходу второго рода. Определены трикритические точки для низкоразмерных моделей Поттса для различных значений состояний спина  $q$ .

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№19-02-00153).

## Литература

1. F.Y. Wu, *Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics*. London: World Scientific, **2009**
2. A.B. Babaev, A.K. Murtazaev, *Materials Letters*, **238**, 321, **2019**

## СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ АТОМИСТИЧЕСКОЕ МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Норман Г. Э.  
*НИУ ВШЭ*  
*gnorman@hse.ru*

Это прорывное направление теоретической физики на стыке с вычислительной физикой, вооружённое лучшими суперкомпьютерными технологиями. Рассмотрена принципиальная схема моделирования, состоящая из двух частей. В первой создаётся объект исследования: решается система уравнений движения для коллектива частиц, взаимодействующих друг с другом; потенциалы межчастичного взаимодействия могут быть парными, многочастичными, включать разрывы и образование химических связей, находиться на каждом шаге численного интегрирования из теории функционала плотности. Во второй части по найденным траекториям частиц находятся свойства системы, классический подход для ионов, квантовый – для электронов.

В качестве примера рассмотрен переход кристаллического молекулярного водорода в полуметаллическое и далее в металлическое состояние при росте давления. Затронуты метастабильные состояния. Предсказательная сила подхода иллюстрируется индустриальным конкурсом по расчету свойств практически важных жидкостей. Метод используется не только для расчёта количественных характеристик, но и для обнаружения новых эффектов; даётся пример кинетической особенности в точке перехода от равновесной к метастабильной фазе. Моделируются не только равновесные системы, но и неравновесные, а также релаксация. Приводятся примеры: нуклеация углеродных наноструктур, коллективные флуктуации при диффузии ионов в жидкостях, динамика фазового перехода в warm dense hydrogen, диффузия нанопор (нанопузырей) в ядерных топливах.

Как можно совместить такие разные темы? А я ещё далеко не всё упомянул. Дело в том, что всё, включая живые системы, состоит из движущихся атомов и молекул. Уравнений движения два: Ньютона и Шредингера. Численные методы их решения – аппарат атомистического (молекулярного) моделирования. Это универсальное «оружие»: цели любые. Решение невозможно без суперкомпьютеров.



При этом возникает проблема построения в России вычислительных кластеров с сетью, оптимальной для задач физики. Дается краткая информация о двух первых российских кластерах, основанных на отечественном суперкомпьютерном интерконнекте Ангара, созданных совместно нашим коллективом в ОИВТ РАН и НИЦЭВТ, и о перспективах поэтапного повышения производительности этих кластеров.

В связи с тем, что цифровая вычислительная техника сегодня приближается к своему физическому пределу, обсуждаются перспективы квантовых компьютеров и симуляторов.

Возможности современных суперкомпьютеров достаточно ограничены. Поэтому, а также в силу иерархии корреляционных длин и времён, атомистический подход следует дополнить многомасштабным подходом для выхода за пределы пространственных и временных масштабов, доступных атомистическому моделированию. Общая идея поясняется на двух примерах: оценке прочности жидкости при динамическом растяжении и моделировании добычи углеводородов от модели поведения жидкости или газа на масштабе наноразмерных пор в горной породе до течения через пористую среду и далее через трещины в пластах к скважине. Атомистический подход, дополненный дальнейшей надстройкой многомасштабной иерархической лестницы, становится магистральным направлением в современной науке.

Помимо самостоятельного значения, суперкомпьютерное атомистическое многомасштабное моделирование выводит наш коллектив на решение трёх «великих» проблем (или круга вопросов), которые, по мнению В. Л. Гинзбурга, нельзя обойти вниманием при преподавании физики и обсуждении её состояния и путей развития. В первой проблеме речь идёт о возрастании энтропии, необратимости и "стреле времени". Эта проблема неизбежна при анализе того, как в классической молекулярной динамике возникает необратимость. Ответ следует искать в квантовой механике. Отсюда переходим ко второй проблеме – интерпретации и понимания квантовой механики. Эту проблему считаем центральной. Она даёт ключ к ответу и на третий вопрос – о связи физики с биологией и, конкретно, проблеме редукционизма. Для этого надо рассматривать живые системы в

рамках атомистического многомасштабного подхода. В совокупности речь идёт о развитии неокопенгагенской парадигмы.

Доклад подготовлен в ходе работы в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации «5-100».

## **РАЗВИТИЕ ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКИ ШВИНГЕРА-КЕЛДЫША ДЛЯ СПИНОВЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПОДХОДА ПОПОВА-ФЕДОТОВА**

Ремизов С. В.<sup>1,2</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*  
*sremizov@gmail.com*

Применение квантово-полевого подхода к описанию квантовых двухуровневых систем сильно осложнено неабелевой природой спиновых операторов. Известен целый ряд возможных способов преодоления этой трудности. Нами предложено дальнейшее развитие одного из таких методов, основывающегося на формализме Попова-Федотова [1], идея которого состоит в замене спиновых операторов двумя фермионными для реализации правильных спиновых коммутационных соотношений. Другой ключевой составляющей этого подхода является введение мнимого электрохимического потенциала для компенсации вклада в статсумму из-за изменения размерности фоковского базиса. Такая компенсация необходима для получения правильных величин для средних значений спиновых операторов. Однако при этом функция распределения фермионов формально становится комплексной. Следующий шаг в развитии этого подхода был сделан Киселевым и Опперманном на основе формализма Швингера-Келдыша [2].

Мы предлагаем дальнейшее развитие этой техники путем введения двухвременных комплексных квантовых полей, чьи средние играют роль функций Грина для спиновых переменных. В качестве естественного пути для построения такого объекта используется метод континуального интеграла и преобразование Хаббарда-

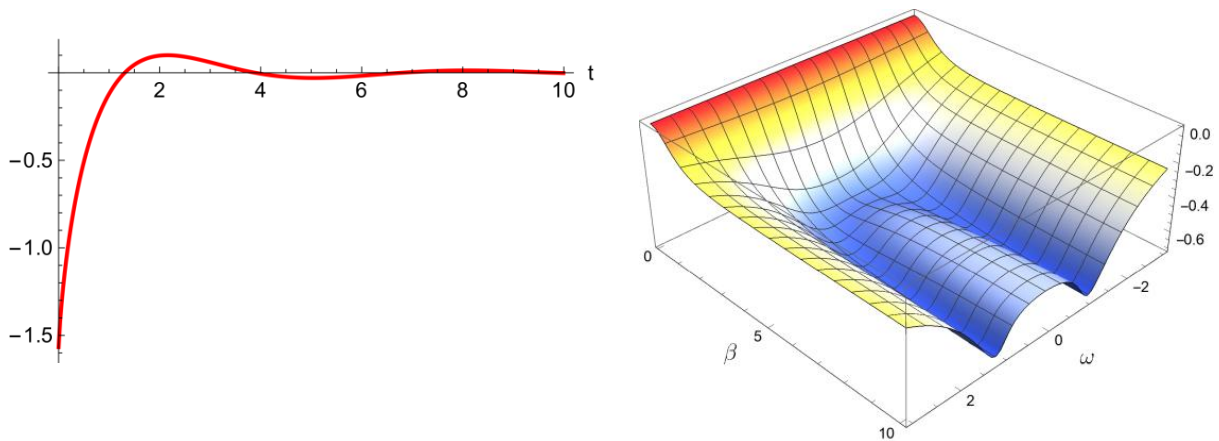


Рис. 1. Поправка к кумулянту спин-спин за счет взаимодействия спина с окружением, нормированная на константу взаимодействия в пределе низких температур. Слева во временном представлении. Справа в частотном представлении показан переход к квантовому случаю.

Стратоновича. Это позволяет использовать стандартную диаграммную технику и производить суммирование диаграммных рядов. Мы показали, что в предлагаемом варианте диаграммной техники для средних величин спиновых операторов «нефизическая» мнимая часть сокращается во всех порядках теории возмущений.

В качестве тестовой и наиболее простой задачи для предлагаемого подхода мы рассмотрели спин-бозонную модель, описывающую взаимодействие спина с окружением. В рамках этой модели в низшем порядке по взаимодействию вычислены поправка к среднему спину и кумулянту спин-спин за счёт взаимодействия спина и бозонного окружения произвольного вида.

Для случая омического окружения мы показали, что в пределе высоких температур, больших, чем расстояние между уровнями двухуровневой системы, поправка к кумулянту спин-спин  $\delta$ -коррелирована в частотном представлении, что свидетельствует о применимости марковского приближения в этом случае. В противоположном предельном случае низких температур этот вклад становится экспоненциально мал и появляется вклад другого типа. Он имеет максимум на частоте, близкой к расстоянию между уровнями. Это приводит к немарковскому поведению системы, что, в частности, отражается на характере поведения кумулянта во временном представлении, который имеет вид затухающих колебаний, как это показано на рис. 1. Учет этого эффекта может быть важен при

симуляции быстрых процессов, например, гейтов при выполнении вычисления на квантовых компьютерах.

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

Литература

1. V.N. Popov and S.A. Fedotov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **94**, 183 **1988**
2. M.N. Kiselev, H. Feldmann, R. Oppermann, Eur. Phys. J. B. **22**, 53 **2001**

## **СЦЕНАРИИ ПЛАВЛЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ - ОСОБЕННОСТИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Рыжов В. Н., Гайдук Е. А., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.

*Институт физики высоких давлений РАН*

*ryzhov@hppi.troitsk.ru*

В докладе обсуждаются основные современные сценарии плавления двумерных систем с критическим анализом применяемых подходов для определения вида перехода методами компьютерного моделирования. После появления теории фазовых переходов в двумерных вырожденных системах – теории Березинского-Костерлица-Таулеса (БКТ) [1-3] – мощное развитие получили теории двумерного плавления. Как известно, в случае трех измерений плавление всегда происходит посредством перехода первого рода. В то же время в случае двух измерений ситуация гораздо более сложная. В настоящее время можно говорить, по крайней мере, о трех возможных сценариях плавления. Прежде всего, это теория Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (BKTHNY) [3-5], в которой был предложен нестандартный сценарий плавления двумерных кристаллов посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой. При этом фазовый переход первого рода также может реализоваться [6]. Кроме того, сравнительно недавно был предложен еще один сценарий плавления, в рамках которого плавление также может происходить посредством двух переходов, однако при этом переход твердое тело – гексатическая фаза происходит посредством непрерывного перехода типа БКТ, а переход гексатическая фаза – изотропная жидкость – посредством перехода первого рода [7-14].

Сценарий плавления может быть определен на основе анализа поведения уравнения состояния и корреляционных функций ориентационного и трансляционного параметров порядка. Критическим моментом в этом случае является существование петель Майера-Вуда в уравнениях состояния. В случае двумерного плавления наличие петель Майера-Вуда является четким признаком перехода первого рода, однако необходимо различать плавление посредством одного перехода первого рода и двухстадийное плавление с ВКТ переходом кристалл-гексатическая фаза и переходом первого рода гексатик-жидкость, что можно сделать с помощью определения положения пределов устойчивости кристаллической и гексатической фаз по отношению к петле Майера-Вуда [14-17]. В докладе обсуждается имеющаяся в ряде работ ошибочная интерпретация того, каким образом должен проявляться в поведении полученного из компьютерного моделирования уравнения состояния непрерывный переход Березинского-Костерлица-Таулеса, и показано, что ошибка кроется в непонимании отличия между непрерывным переходом второго рода типа перехода в двумерной модели Изинга и БКТ переходом бесконечного рода.

Работа поддержана грантами РФФ 19-12-00092 и РФФИ 18-02-00981.

#### Литература

1. В. Л. Березинский, ЖЭТФ, **59**, 907, **1970**
2. J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, J. Phys. C, **6**, 1181, **1973**
3. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН, **187**, 921, **2017**
4. D. R. Nelson, V. I. Halperin, Phys. Rev. B, **19**, 2457, **1979**
5. A. P. Young, Phys. Rev. B, **19**, 1855, **1979**
6. В. Н. Рыжов, ЖЭТФ, **100**, 1627, **1991**
7. E. P. Bernard, W. Krauth, Phys. Rev. Lett., **107**, 155704, **2011**
8. S. C. Kapfer, W. Krauth, Phys. Rev. Lett., **114**, 035702, **2015**
9. E. N. Tsiok, D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, Phys. Rev. E, **92**, 032110, **2015**
10. E. N. Tsiok, Y. D. Fomin Y.D., Ryzhov V.N., Physica A, **490**, 819, **2018**
11. D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Soft Matter, **10**, 4966, **2014**
12. D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, J. Chem. Phys., **141**, 18C522, **2014**

13. N. P. Kryuchkov, S. O. Yurchenko, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, *Soft Matter*, **14**, 2152, **2018**
14. E. A. Gaiduk, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, *Molecular Physics*, **117**, 29109, **2019**
15. Y. D. Fomin, E. A. Gaiduk, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, *Molecular Physics*, **116**, 3258, **2018**
16. E. N. Tsiok, E. A. Gaiduk, Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, *Soft Matter*, **16**, 3962, **2020**
17. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, *УФН*, **190**, 449, **2020**

## **МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ МАТЕРИАЛОВ**

Рыльцев Р. Е.<sup>1,2,3</sup>, Балякин И. А.<sup>1,2</sup>, Щелкачев Н. М.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург*

<sup>2</sup>*Уральский федеральный университет, Екатеринбург*

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

*Москва*

*rrylcev@mail.ru*

Одной из глобальных проблем атомистического моделирования является проблема соотношения точности и вычислительной затратности расчетов. Действительно, первопринципные квантово-механические методы, которые обладают наибольшей точностью, позволяют изучать системы, состоящие всего лишь из сотен частиц на временах порядка не более наносекунд, что является недостаточным для многих практически важных задач. С другой стороны, методы классической молекулярной динамики позволяют изучать системы из  $10^6$ - $10^9$  атомов на временах вплоть до микросекунд. Однако точность классического моделирования очень сильно ограничена необходимостью использования эмпирических межчастичных потенциалов, которые во многих случаях неспособны адекватно аппроксимировать сложный характер межатомного взаимодействия в реальных системах. В последние годы появился подход, позволяющий эффективно решать указанную проблему. Он основан на использовании методов машинного обучения для генерирования потенциалов межатомного взаимодействия (MLIP – Machine Learning Interatomic Potentials) на основе результатов первопринципных

квантово-механических расчетов. Моделирование с помощью MLIP позволяет достигнуть точности, близкой к точности первопринципных расчетов при меньших на порядки вычислительных затратах. Таким образом, использование MLIP представляет собой золотую середину в вопросе выбора между точностью и вычислительной эффективностью. Технология применения машинного обучения в компьютерном моделировании материалов представляет собой активно развивающуюся отрасль науки [1-8]. В связи с этим развитие данных методов и их применение к описанию перспективных материалов является актуальной задачей, находящейся на переднем крае современного материаловедения.

Интерес к данной проблематике резко возрос в последние несколько лет и продолжает неуклонно увеличиваться. В настоящее время предложено несколько подходов к построению MLIP на основе данных первопринципных расчетов, которые реализованы в виде программных пакетов, доступных пользователям. Среди наиболее перспективных методов и пакетов можно отметить следующие:

- 1) Пакет n2p2, University of Göttingen & University of Vienna [1,2];
- 2) Пакет DeepMD, Princeton University [3,4];
- 3) Метод SNAP (Spectral Neighbor Analysis Method), Sandia National Laboratories, USA, [5];
- 4) Метод MTP (Moment Tensor Potentials), Инновационный центр «Сколково» [6];
- 5) VASP on-the-fly machine learning force field generation, University of Vienna [7, 8].

В докладе будет дан обзор указанных методов, а также изложены оригинальные результаты, полученные авторами в рамках данных подходов при изучении систем различной природы: металлических сплавов Cu-Zr и Al-Cu-(Fe,Ni), сетеобразующей стеклообразующей системы SiO<sub>2</sub>, а также высокоэнтропийных сплавов на основе жаропрочных элементов.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ (№ 18-12-00438).

#### Литература

1. J. Behler, J. Chem. Phys., **145**, 170901, **2016**
2. A. Singraber, J. Behler, C. Dellago, J. Chem. Theory Comput., **15**, 1827, **2019**
3. L. Zhang, J. Han, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Lett. **120**, 143001, **2018**

4. L. Zhang, D.-Y. Lin, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Materials **3**, 023804, **2019**
5. A.P. Thompson, L.P. Swiler, C.R. Trott, S.M. Foiles, G.J. Tucker, J. Comput. Phys., **285**, 316, **2015**
6. A.V. Shapeev, Multiscale Model. Simul., **14**, 1153, **2016**
7. R.Jinnouchi, F. Karsai, G. Kresse, Phys. Rev. B **100**, 014105, **2019**
8. F. Karsai, G. Kresse, M. Bokdam, Phys. Rev. Lett. **122**, 225701, **2019**

## ПЛАНКОВСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В МЕТАЛЛАХ КАК ИЛЛЮЗИЯ

Садовский М. В.

*Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург  
sadovski@iep.uran.ru*

Линейный рост электросопротивления ВТСП купратов и ряда других аналогичных систем с температурой, начиная с самых низких температур остается загадочным на протяжении уже многих лет. В последние годы была предложена концепция «планковской» релаксации в металлах, призванная объяснить такое поведение и установить универсальный квантовый предел для температурно - зависящей частоты релаксации электронов в металлах. Эта концепция получила, казалось - бы, убедительное экспериментальное подтверждение. Мы рассматриваем простейшую модель линейного по температуре роста электросопротивления в металлах. Показывается, что наблюдавшийся на эксперименте универсальный “планковский” предел для частоты релаксации является прямым следствием определенного способа представления экспериментальных данных по электросопротивлению и, в этом смысле, является иллюзорным.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-02-00011.

### Литература

1. М. В. Садовский, Письма ЖЭТФ, **111**, 203, **2020**



## ПЕРЕХОДЫ МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР В РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ДОДЕКАБОРИДАХ $R_{1-x}Yb_xB_{12}$

Случанко Н. Е.  
*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН,  
Москва, Россия  
nes@lt.gpi.ru*

В докладе представлен обзор физических свойств редкоземельных (RE) додекаборидов  $RB_{12}$ , которые характеризуются каркасно-кластерной кристаллической структурой со слабо связанным состоянием РЗ ионов. Согласно представленному анализу литературы RE додекабориды являются сильно коррелированными электронными системами, в которых одновременно активными оказываются зарядовые, спиновые, орбитальные и решеточные степени свободы. Это объясняет сложность всех соединений  $RB_{12}$ , включая антиферромагнитные ( $TbB_{12}$  –  $TmB_{12}$ ) и немагнитный ( $LuB_{12}$ ) металлы, с одной стороны, и так называемый Кондо-изолятор - соединение  $YbB_{12}$  и твердые растворы замещения  $Yb_xR_{1-x}B_{12}$  на его основе, с другой.

Показано, что аномальные свойства додекаборидов  $RB_{12}$  обусловлены развитием кооперативной динамической ян-теллеровской (ЯТ) неустойчивости ковалентной подрешетки бора, причем ЯТ-эффект является причиной как тригональных и тетрагональных искажений жесткого борного ковалентного каркаса, так и понижения симметрии ГЦК кристаллической структуры додекаборидов. Скоррелированные ЯТ динамические искажения кубооктаэдров  $B_{12}$  являются причиной возникновения коллективных мод в подрешетке бора и квазилокальных колебаний (rattling modes) тяжелых РЗ ионов, что вызывает модуляцию электронной плотности зоны проводимости и приводит к появлению полос динамического заряда (страйпов) в этих сильно коррелированных соединениях.

Рассматривается механизм, ответственный за появление динамических зарядовых страйпов, и роль эффектов электронного фазового расслоения в возникновении аномальных свойств как в немагнитном реперном соединении  $LuB_{12}$ , так и при формировании сложных анизотропных магнитных фазовых диаграмм в форме мальтийского креста в антиферромагнетиках  $RB_{12}$ , в которых наблюдается большое количество различных магнитных фаз и фазовых переходов.

Основное внимание уделено обсуждению переходов металл-изолятор (ПМИ) в  $\text{YbB}_{12}$  и в додекаборидах на основе Yb. Показано, что ПМИ в  $\text{Yb}_x\text{R}_{1-x}\text{B}_{12}$  наблюдаются в условиях неустойчивости  $4f$ -электронной оболочки ионов Yb, которая, наряду с ян-теллеровской неустойчивостью борного каркаса, обеспечивает дополнительный канал зарядовых и спиновых флуктуаций. Анализ имеющихся экспериментальных результатов приводит к заключению о неприменимости модели кондо-изолятора в  $\text{YbB}_{12}$ . Представлены аргументы в пользу возникновения в додекаборидах на основе иттербия колебательно связанных пар Yb-Yb, которые следует считать основным фактором, ответственным за диэлектризацию спектра  $\text{YbB}_{12}$  [1].

Исследование выполнено при поддержке грантов РФФИ (№17-12-01426) и РНФ (№18-02-01152).

Литература

1. Nikolay E. Sluchanko, Magnetism, quantum criticality, and metal-insulator transitions in  $\text{RB}_{12}$ , arXiv:2004.06371.

## СТОХАСТИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ВБЛИЗИ БИНОДАЛИ

Сон Л. Д.

*Уральский государственный педагогический университет,  
Уральский технический институт связи и информатики  
ldson@yandex.ru*

Двухкомпонентный регулярный раствор рассматривается вблизи линии расслоения на две фазы (т.н. бинодали). Состояние системы описывается двумя полями:  $\psi$  – полем отклонения концентрации от среднего значения, и  $\varphi$  – полем объемной доли второй фазы. Концентрационная динамика описывается системой уравнений:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \gamma_1 \Delta \frac{\delta \Phi}{\delta \psi} + g \frac{\delta \Phi}{\delta \varphi} + \theta_1, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \gamma_2 \Delta \frac{\delta \Phi}{\delta \varphi} - g \frac{\delta \Phi}{\delta \psi} + \theta_2. \quad (2)$$

Здесь  $\Phi$  – вклад полей  $\psi, \varphi$  в термодинамический потенциал, а случайные «силы»  $\theta_1, \theta_2$ , согласно ФДТ, обладают следующими корреляционными свойствами:

$$\langle \theta_1(\mathbf{r}, t) \theta_1(\mathbf{r}', t') \rangle = -\gamma_1 T \Delta \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (3)$$

$$\langle \theta_2(\mathbf{r}, t) \theta_2(\mathbf{r}', t') \rangle = -\gamma_2 T \Delta \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (4)$$

Величина  $\Phi$  моделируется следующим образом:

$$\Phi = \int L d\mathbf{r}; \quad L = \frac{m}{2} \psi^2 + \frac{k}{2} (\nabla \psi)^2 - \frac{\alpha}{2} \varphi^2 \psi + \frac{\beta}{2} \varphi^2 + f(\varphi). \quad (5)$$

Данное выражение было введено нами ранее [1]. В (5) функция  $f(\varphi)$  моделирует взаимодействие между частицами второй фазы. В докладе исследуются возможные решения системы (1, 2) при различных начальных условиях и взаимодействиях, описываемых функцией  $f(\varphi)$ . Особый интерес вызывают осциллирующие и хаотические (стохастические) решения.

Исследование выполнено при поддержке грантов РФФИ № 18-03-00433, 18-02-00643.

#### Литература

1. Сон Л.Д., Попель П.С. Концентрационная релаксация в жидких эвтектиках. Доклад на 18 школе-конференция «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» - «Идеи и методы физики конденсированного состояния III». Сочи, 2019

## АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Стегайлов В. В.<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>НИУ ВШЭ <sup>2</sup>ОИВТ РАН <sup>3</sup>МФТИ

*stegailov.vv@mipt.ru*

Атомистическое моделирование твердых тел основано на численном решении уравнений движения для атомов и/или на численном решении электронно-структурной задачи. Использование данных подходов позволяет рассчитывать свойства моделей твердых тел в важных с практической точки зрения случаях, когда применение аналитических подходов теоретической физики не способно довести решение до численного результата. Важными классами подобных задач являются модели описания переносных свойств твердых тел, в которых необходимо учитывать их реальную микроструктуру и компонентный состав. В докладе будет рассказано о расчете диффузии точечных дефектов [1, 2], в том числе и нанополостей, и о

расчетах динамики дислокаций [3], модели которых основаны на эмпирических моделях межатомного взаимодействия [4]. Использование методов квантовой молекулярной динамики позволяет описывать электронный транспорт в конденсированной фазе. Будет представлены результаты по динамике экситонных возбуждений в водороде [5]. Кроме того, будет затронут вопрос описания электронного транспорта в сильно-коррелированных материалах. Работа частично поддержана грантом РФФИ 18-08-01495.

#### Литература

1. Antropov A., Stegailov V. Nanobubbles diffusion in bcc uranium: Theory and atomistic modelling //Journal of Nuclear Materials. – 2020. – С. 152110.
2. Smirnov G. S., Stegailov V. V. Formation free energies of point defects and thermal expansion of bcc U and Mo //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2019. – Т. 31. – №. 23. – С. 235704.
3. Kuksin A. Y., Stegailov V. V., Yanilkin A. V. Molecular-dynamics simulation of edge-dislocation dynamics in aluminum //Doklady Physics. – SP MAIK Nauka/Interperiodica, 2008. – Т. 53. – №. 6. – С. 287-291.
4. Smirnova D. E., Starikov S. V., Stegailov V. V. Interatomic potential for uranium in a wide range of pressures and temperatures //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2011. – Т. 24. – №. 1. – С. 015702.
5. Fedorov I. D., Orekhov N. D., Stegailov V. V. Nonadiabatic effects and excitonlike states during the insulator-to-metal transition in warm dense hydrogen //Physical Review B. – 2020. – Т. 101. – №. 10. – С. 100101.

### **ОРБИТАЛЬНЫЕ СТЕПЕНИ СВОБОДЫ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ**

Стрельцов С. В.

*Институт физики металлов УрО РАН*

*streltsov@imp.uran.ru*

The properties of transition metal compounds are largely determined by nontrivial interplay of different degrees of freedom: charge, spin, lattice, but also orbital ones. Especially rich and interesting effects occur in systems with orbital degeneracy. They result in the famous Jahn--Teller

effect leading to a plethora of consequences, in static and in dynamic properties, including nontrivial quantum effects. In the present talk we discuss the main phenomena in the physics of such systems, paying central attention to the novel manifestations of those. First we will shortly discuss the basic phenomena and their description and then concentrate on several specific directions in this field. One of them is the reduction of effective dimensionality in many systems with orbital degrees of freedom due to directional character of orbitals, with concomitant appearance of some instabilities leading in particular to the formation of dimers, trimers and similar clusters in a material. The properties of such cluster systems, largely determined by their orbital structure, are discussed in detail, and many specific examples of those in different materials are presented. Another big field which acquired special significance relatively recently is the role of relativistic spin--orbit interaction. The mutual influence of this interaction and the more traditional Jahn--Teller physics is treated in details in the second part of the review. In discussing all these questions special attention is paid to novel quantum effects in those.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 20-62-46047).

Литература

1. С.В. Стрельцов, Д.И. Хомский УФН, **187**, 1205, **2017**

## **ВЗАПЕРТИ: ВЛИЯНИЕ КОНФАЙНМЕНТА НА ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ**

Фомин Ю. Д., Циок Е. Н., Рыжов В. Н.

*Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН  
fomin314@mail.ru*

Известно, что поведение систем в условиях ограниченной геометрии (в конфайнменте) может сильно отличаться от объемных систем [1]. Наличие ограничивающих стенок может приводить к изменению устойчивой кристаллической структуры, в том числе могут формироваться структуры, которые не могут образоваться в отсутствии ограничений. Конфайнмент может существенно изменять температуру плавления, причем как в сторону увеличения, так и в сторону уменьшения. Наличие конфайнмента может приводить и к изменению динамических свойств системы, например, к

сверхбыстрой диффузии, наблюдавшейся в воде, заключенной в нанотрубки. Все это говорит о большой важности изучения систем в условиях наноконфайнмента.

В данной работе мы рассматриваем структурные свойства нескольких систем в условиях конфайнмента. На сегодняшний день принята точка зрения, что при ширине щелевой поры от примерно двух до десяти диаметров частицы кристаллическая структура системы должна описываться в терминах некоторого количества двумерных слоев с определенной структурой (например, 5 слоев с треугольной решеткой). При этом считается, что подобную структуру нельзя описать в терминах трехмерных кристаллических структур.

В данной работе мы показываем, что на самом деле структуры из разного количества двумерных слоев являются срезами ГЦК и ГПУ решеток. Такое рассмотрение дает возможность построить «непрерывный путь» от двумерных структур к трехмерным: треугольный 2д кристалл можно рассматривать как (111) грань ГЦК решетки. Если система не двумерная, а квазидвумерная, то есть заключенная в узкую щелевую пору, то ее структура является срезом ГЦК или ГПУ кристалла. Наконец, в трехмерном случае система с простым потенциалом кристаллизуется в ГЦК решетку.

Работа поддержана грантами РФФ (№ 19-12-00092) и РФФИ (№ 18-02-00981).

#### Литература

1. G. Ali Mansoori and S. A. Rice, *Advances in Chemical Physics*, **156**, 197, 2014

### **ВЛИЯНИЕ ПРИТЯЖЕНИЯ НА ФАЗОВУЮ ДИАГРАММУ И СЦЕНАРИЙ ПЛАВЛЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ С ОБОБЩЕННЫМ (n-m) ПОТЕНЦИАЛОМ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА**

Циок Е. Н., Фомин Ю. Д., Тареева Е. Е., Гайдук Е. А., Рыжов В. Н.  
*Институт физики высоких давлений РАН*  
*elena.tsiok@gmail.com*

Потенциал Леннарда-Джонса 12-6 (LJ) является, пожалуй, наиболее широко используемым парным потенциалом в молекулярном моделировании. Однако, для описания некоторых

систем требуется модифицировать параметры потенциала LJ, например, степени членов  $1/r$ . Цель работы – исследование влияния формы притяжения и радиуса дальнего действия при постоянной ветви отталкивания на фазовую диаграмму и сценарий плавления двумерных систем на примере модельного (nm)-потенциала LJ с обобщенными индексами степени ветви притяжения ( $m$ ) и отталкивания ( $n$ ):  $U(r)=\varepsilon/(n-m)*(m/r^n - n/r^m)$ , где  $\varepsilon=1$  – глубина ямы в положении равновесия  $r_0=1$ . Известно, что сценарии 2D плавления зависят от «жесткости» отталкивания, а роль притяжения до сих пор остается неясной. На данный момент для микроскопического описания 2D плавления известны три сценария [1, 2]: (i) теория Березинского – Костерлица – Таулесса – Хальперина – Нельсона – Янга (BKTHNY), в рамках которой 2D плавление происходит посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой; (ii) плавление посредством одного перехода первого рода; (iii) переход кристалл-гексатическая фаза происходит посредством непрерывного перехода типа ВКТ, а переход гексатическая фаза-изотропная жидкость – посредством перехода первого рода.

Несмотря на то, что в настоящее время существует ряд работ по исследованию методами компьютерного моделирования плавления 2D кристалла с потенциалом LJ, тем не менее, до сих пор не достигнуто консенсуса по вопросу о механизме (сценарии) этого фазового перехода. В некоторых исследованиях предпочтение отдается переходу первого рода из твердого состояния в жидкое, в то время как другие склоняются к теории BKTHNY, как, например, в статье 2019 года [3], с сомнительным результатом при высоких температурах, где силы притяжения уже незначительны, что должно приводить к сценарию плавления системы с потенциалом  $1/r^{12}$  (третий сценарий) [4], а не BKTHNY.

Моделирование системы с потенциалом (12-6) LJ и (nm)-потенциалом при постоянном  $n=12$  и  $m=3, 6, 9, 11$ , состоящей из 20000,  $256^2$  и  $512^2$  частиц проводилось методом молекулярной динамики в NVT-ансамбле в широком диапазоне плотностей и температур от  $T=0.3$  (выше тройной точки (12-6) LJ) до  $T=50.0$ . Для всех систем на всех изотермах наблюдалась петля Майера – Вуда, которая является четким признаком перехода первого рода. Было рассчитано асимптотическое поведение корреляционных функций ориентационного и трансляционного параметров порядка для определения границ устойчивости кристалла и гексатической фазы. Сопоставление пределов стабильности треугольного кристалла и

гексатической фазы с петлей Майера-Вуда позволило определить сценарии перехода. Во всех системах на кривой плавления треугольного кристалла при приближении к тройной точке была обнаружена трикритическая точка, в которой происходит смена сценария плавления от третьего (двухстадийного) к одному переходу первого рода, что качественно согласуется с результатами работы [5]. Было показано, что на фазовую диаграмму кардинально влияют форма притягивающей ямы, её степень асимметричности относительно положения равновесия и радиус дальнего действия сил притяжения. С увеличением  $m$  критическая температура перехода газ-жидкость понижается, двухфазная область сужается, а отношение между температурами критической и тройной точек становится близким к единице при  $m=11$ . Таким образом, в зависимости от параметра  $m$  можно осмысленно подобрать модель  $(nm)$ -потенциала для описания экспериментов в простых жидкостях и коллоидных суспензиях.

Работа поддержана грантом РФФИ 19-12-00092.

#### Литература

1. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН, **187**, 921, **2017**
2. E. N. Tsiok, E. A. Gaiduk, Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, Soft Matter, **16**, 3962, **2020**
3. A. Hajibabaei and K. S. Kim, Phys. Rev. E **99**, 022145, **2019**
4. S. C. Kapfer. W. Krauth, Phys. Rev. Lett., **114**, 035702, **2015**
5. Y.-W. Li and M. P. Ciamarra, Phys. Rev. Lett., **124**, 218002, **2020**

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РАСПЛАВОВ

Щелкачев Н. М.<sup>1</sup>, Рыльцев Р. Е.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*ИФВД РАН*

<sup>2</sup>*ИМет УрО РАН*

*chtchelkatchev@hppi.troitsk.ru*

Одна из наиболее актуальных задач на стыке физики и химии -- переход к передовым цифровым способам конструирования современных функциональных материалов и создание систем обработки больших объемов данных, с использованием машинного обучения и искусственного интеллекта.



Мы провели комплексное исследование многокомпонентных металлических расплавов, содержащих от трех до пяти компонент, современными методами первопринципного моделирования. Удалось добиться значительного ускорения расчетов, используя генетический алгоритм УСПЕХ, для начального перемешивания компонент сплавов по объему ячейки, используя подход, максимизирующий степень беспорядка с учетом периодических граничных условий.

Методы машинного обучения позволили сконструировать потенциалы взаимодействия на основе нейронных сетей, позволяющие использовать классическую молекулярную динамику для описания свойств расплавов. Точность таких расчетов сопоставима с квантовой молекулярной динамикой, но скорость моделирования и размер систем – на порядок больше. Это позволяет исследовать транспортные свойства, такие как вязкость, и рассматривать область параметров, недоступную для квантовых расчетов, например, где система значительно переохлаждена.

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

## **АНТИКРОССИНГ МОД В ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЯХ: ТЕОРИЯ И ПРЯМОЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ НАБЛЮДЕНИЕ**

Крючков Н. П., Яковлев Е. В., Мистрюкова Л. А., Бражкин В. В.

Юрченко С. О.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана*

*st.yurchenko@mail.ru, kruchkov\_nkt@mail.ru*

Концепция коллективных возбуждений имеет ключевое значение для понимания и описания структурных, термодинамических и транспортных свойств различных систем. В последние годы существенно возрос интерес к проблеме коллективных возбуждений в неупорядоченных системах, таких как стекла и жидкости. Во многом это обусловлено желанием исследователей установить новые универсальные закономерности связи структурных и термодинамических свойств, а кроме того, желанием изучить сценарий перехода флюидов из состояний с жидко-подобной динамикой в газо-подобную [1]. Однако, понимание и описание

коллективных мод в неупорядоченных средах остается сложной проблемой в физике конденсированного состояния.

В жидкостях нет дальнего порядка, но все еще существуют продольные и поперечные (сильно затухающие) возбуждения, при этом поперечные моды устойчивы только в коротковолновой области [2]. В отличие от кристаллов, анизотропия и структурная неупорядоченность играют ключевую роль в коллективной динамике жидкостей. Одним из следствий является возможность наблюдения эффекта «смешивания» мод в экспериментах и компьютерных симуляциях [3,4]: в спектрах продольных мод обнаруживаются следы поперечных мод, и наоборот. Смешивание мод обеспечивает их эффективное взаимодействие между собой, что означает, что соответствующие дисперсионные кривые для продольных и поперечных возбуждений не могут пересекаться между собой в коротковолновой области (антикроссинг мод).

В настоящей лекции будет представлена (i) теоретическая модель [5] антикроссинга мод в простых жидкостях, (ii) сравнение теоретических результатов с данными компьютерного моделирования методом молекулярной динамики для различных сжиженных благородных газов [5], а также (iii) результаты прямого наблюдения антикроссинга мод в жидкой комплексной (пылевой) плазме [6, 7].

В результате было установлено, что в коротковолновом диапазоне длин волн возникает антикроссинг мод в жидкостях: вместо пересекающихся продольных и поперечных дисперсионных зависимостей формируются гибридные высоко- и низко-частотные моды с непересекающимися дисперсионными зависимостями. При этом их взаимодействие (и перераспределение спектров) осуществляется благодаря интенсивному рассеянию сильно затухающих коротковолновых элементарных возбуждений в структуре жидкости (из-за неупорядоченной структуры). Полученные результаты открывают новые перспективы для анализа элементарных возбуждений и явлений переноса в различных жидкостях, от сжиженных благородных газов и металлических расплавов до комплексных флюидов и молекулярных жидкостей.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ №17-19-01691, РФФИ №20-32-70186 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н. Э. Баумана.

#### Литература

1. K. Trachenko and V. V. Brazhkin, Reports on Progress in Physics **79**, 016502, **2015**

2. N. P. Kryuchkov, L. A. Mistryukova, V. V. Brazhkin, and S. O. Yurchenko, *Scientific Reports* **9**, 10483, **2019**
3. S. Hosokawa, W.-C. Pilgrim, H. Sinn, and E. E. Alp, *Journal of Physics: Condensed Matter* **20**, 114107, **2008**
4. S. Hosokawa, M. Inui, Y. Kajihara, K. Matsuda, T. Ichitsubo, W.-C. Pilgrim, H. Sinn, L. E. Gonz'alez, D. J. Gonz'alez, S. Tsutsui, and A. Q. R. Baron, *Physical Review Letters* **102**, 105502, **2009**
5. N. P. Kryuchkov, V. V. Brazhkin, and S. O. Yurchenko, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **10**, 4470, **2019**
6. E. V. Yakovlev, N. P. Kryuchkov, P. V. Ovcharov, A. V. Sapelkin, V. V. Brazhkin, and S. O. Yurchenko, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **11**, 1370 **2020**
7. L. Couedel, V. M. Nosenko, S. Zhdanov, A. V. Ivlev, I. Laut, E. V. Yakovlev, N. P. Kryuchkov, P. V. Ovcharov, A. M. Lipaev, and S. O. Yurchenko, *Phys.-Usp.* **62**, 1000, **2019**

# **ДОКЛАДЫ**



# АНИЗОТРОПИЯ МАЛЬТИЙСКОГО КРЕСТА В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ $TmB_{12}$ С ДИНАМИЧЕСКИМИ ЗАРЯДОВЫМИ СТРАЙПАМИ

Азаревич А. Н.<sup>1,2</sup>, Богач А. В.<sup>1</sup>, Глушков В. В.<sup>1,2</sup>, Демишев С. В.<sup>1,2</sup>,  
Гаврилкин С. Ю.<sup>3</sup>, Шицевалова Н.Ю.<sup>4</sup>, Филиппов В.Б.<sup>4</sup>, Габани С.<sup>5</sup>,  
Флахбарт К.<sup>5</sup>, Случанко Н.Е.<sup>1,2</sup>

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

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

<sup>3</sup>*Физический Институт им. П.Н.Лебедева РАН*

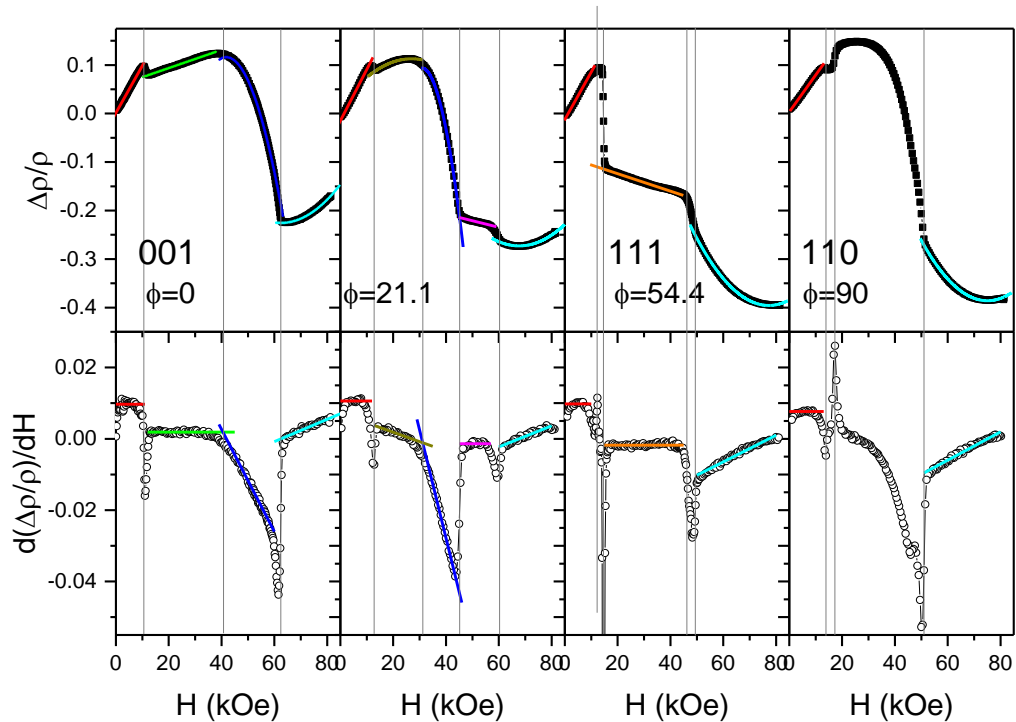
<sup>4</sup>*Институт Проблем Материаловедения им. И.М.Францевича НАНУ*

<sup>5</sup>*Институт Экспериментальной Физики САН*

*azarevich@lt.gpi.ru*

Додекабориды редкоземельных (РЗ) металлов интересны как модельные системы с относительно простой кристаллической структурой и многочисленными конкурирующими между собой взаимодействиями, определяющими формирование основного состояния при низких температурах. В работе подробно исследуется анизотропия транспортных и магнитных свойств додекаборида тулия ( $TmB_{12}$ ) в рамках подхода, развитого в [1] для твёрдых растворов  $Ho_{1-x}Lu_xB_{12}$ . Соединение  $TmB_{12}$  при температуре  $T < T_N = 3.2K$  переходит в антиферромагнитное состояние с несколькими ориентационными фазовыми переходами при изменении величины и направления магнитного поля. При описании поведения магнетосопротивления в этих системах считается, что перераспределение электронной плотности в магнитном поле между РККИ осцилляциями и динамическими зарядовыми страйпами [2] приводит к резкому подавлению косвенного обменного взаимодействия магнитных моментов РЗ ионов через электроны проводимости.

Используемые в экспериментах монокристаллические образцы получены бестигельной вертикальной зонной плавкой в инертной атмосфере, качество и ориентация кристаллов определялись рентгеноструктурными методами, состав проверялся микрозондовым анализом. При измерениях анизотропии в экспериментах по измерению сопротивления и намагниченности вращение образцов в поперечном внешнем магнитном поле осуществлялось относительно оси [110], что позволило сопоставить особенности на кривых  $M(\varphi, H)$  и  $\rho(\varphi, H)$ , соответствующие фазовым переходам.



Как и для  $\text{Ho}_{1-x}\text{Lu}_x\text{V}_{12}$  на угловой фазовой диаграмме  $\text{TmV}_{12}$  в полярных координатах близкие к радиальным фазовые границы разделяют весь диапазон углов на три сектора, отвечающих широкой окрестности основных кристаллографических направлений  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ , каждый из секторов характеризуется своим видом полевой зависимости магнетосопротивления (см. рис.). На полученных кривых между фазовыми переходами наблюдаются протяженные участки вида  $\Delta\rho/\rho = -B(H-H_0)^2 + A(H-H_0)$ . Отрицательный квадратичный по полю член интерпретируется как рассеяние электронов проводимости на локализованных магнитных моментах ионов  $\text{Tm}^{3+}$ . Как и в случае  $\text{Ho}_{1-x}\text{Lu}_x\text{V}_{12}$  [1], линейный член обусловлен рассеянием электронов на волне спиновой плотности, однако в случае  $\text{TmV}_{12}$  для интерпретации линейных участков с отрицательным коэффициентом наклона предлагается также рассмотреть дополнительный механизм, определяющий локальную спиновую поляризацию носителей заряда и связанный с этим канал рассеяния.

Исследование выполнено при поддержке проектов РФФИ №17-12-01426 и РФФИ №18-02-01152.

#### Литература

1. A.L. Khoroshilov et al., Phys. Rev. B, **99**, 174430, 2019
2. N. Sluchanko et al., Phys. Rev. B, **97**, 035150, 2018

# ДЕТЕКТИРОВАНИЕ МАЙОРАНОВСКИХ СОСТОЯНИЙ В ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОМ УСТРОЙСТВЕ С ТОПОЛОГИЧЕСКИМ СВЕРХПРОВОДНИКОМ

Аксенов С. В.<sup>1</sup>, Вальков В. В.<sup>1</sup>, Каган М. Ю.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН,  
660036 Красноярск*

<sup>2</sup>*Национальный исследовательский университет  
Высшая школа экономики, 101000 Москва*

<sup>3</sup>*Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН,  
119334 Москва  
asv86@iph.krasn.ru*

Интерес к майорановским состояниям (МС) в твердотельных системах обусловлен перспективами их использования в качестве кубитов. Существенным преимуществом МС является их пространственная нелокальность [1]. В результате, кубит, сформированный парой МС, устойчив к действию локальных процессов некогерентного рассеяния. Одной из систем, перспективных с точки зрения экспериментального обнаружения МС, являются гибридные проволоки полупроводник с сильной спин-орбитальной связью/сверхпроводник (далее сверхпроводящая проволока) [2]. Несмотря на прогресс в области синтеза таких структур, на сегодняшний день в научном сообществе продолжается дискуссия о трактовке экспериментальных данных по туннельной спектроскопии этих систем. В частности, рядом исследователей отмечается, что квантование кондуктанса, которое вызвано резонансным андреевским отражением на МС, также может быть связано и с реализацией обычных андреевских состояний (АС) [3]. Таким образом, чтобы продвинуться в решении проблемы обнаружения МС, необходимо исследовать отличия, возникающие при транспорте через МС и АС. Кроме того, важным является поиск возможностей детектирования других свойств МС (не только нулевой энергии), в частности, его нелокальности.

В работе проанализирована возможность детектирования МС в кольце Ааронова-Бома, рукава которого соединены мостиком в виде сверхпроводящей проволоки. Существенно, что исследования транспортных характеристик интерференционного устройства проведены, принимая во внимание взаимодействие между низкоэнергетическими состояниями проволок в нормальной фазе,



составляющих рукава, и мостика. На основе метода неравновесных функций Грина в приближении линейного отклика показано, что в магнитолевой зависимости кондактанса кольца возникает ряд симметричных и асимметричных резонансов (резонансы Брейта-Вигнера и Фано, соответственно), когда мостик переводится магнитным полем в топологически нетривиальную фазу [4]. Изучена зависимость свойств резонансов Фано от пространственного распределения низкоэнергетического состояния в сверхпроводящей проволоке (МС или АС). Кроме того, тип этого состояния может быть эффективно протестирован в рамках частного случая кольца - Т-образной схемы транспорта.

При асимметричном подключении устройства к контактам в кондактансе возникают дополнительные пики Фано, когда мостик находится в топологически нетривиальной фазе. Обнаружено, что такие резонансы коллапсируют с ростом длины мостика или, другими словами, когда перекрытие майорановских волновых функций становится пренебрежимо малым [5]. На основе анализа бесспиновой системы показано, что этот эффект связан с возникновением Т-образных цепочек майорановских фермионов, что приводит к увеличению кратности вырождения состояния с нулевой энергией и реализации связанного состояния в континууме.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН №32 «Наноструктуры: физика, химия, биология, основы технологий», Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 19-02-00348, 20-32-70059, 20-02-00015), Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: «Кулоновские взаимодействия в проблеме реализации майорановских мод в низкоразмерных системах с нетривиальной топологией» (№ 19-42-240011). А.С.В. выражает благодарность гранту Президента РФ МК-1641.2020.2 за оказанную поддержку. К.М.Ю. благодарит Программу фундаментальных исследований НИУ ВШЭ за поддержку.

#### Литература

1. A. Kitaev, *Ann. Phys.*, **303**, 2, **2003**
2. R.M. Lutchyn et al., *Nat. Rev. Mater.*, **3**, 52, **2018**
3. C. Moore et al., *Phys. Rev. B*, **98**, 155314, **2018**
4. V.V. Valkov, M.Yu. Kagan, S.V. Aksenov, *J. Phys.: Cond. Mat.*, **31**, 225301, **2019**
5. С.В. Аксенов, М.Ю. Каган, *Письма в ЖЭТФ*, **111**, 321, **2020**

# МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПОЛЯ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Анкудинов В. Е., Щелкачев Н. М.

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

*Москва*

*vladimir@ankudinov.org*

Модель кристаллического фазового поля (КФП, Phase Field Crystal) [1, 2] сформулирована для описания переходов из однородного состояния в периодическое кристаллическое (аналогично переходам Ландау-Бразовского [3–5]), а также между различными периодическими состояниями на временах, сопоставимых со временем диффузии [6–8]. Модель КФП – континуальная атомистическая модель, основанная на описании свободной энергии в виде функционала поля атомной плотности периодического в твердой фазе и однородного в жидкой [9]. В работе показано развитие структурной модели кристаллического фазового поля (ХРФС) [7, 8] для межчастичных взаимодействий описываемых произвольной изотропной корреляционной функцией [10].

Для безразмерного поля атомной плотности  $\rho(\mathbf{r}, t)$  запишем свободную энергию модели КФП, включающую идеальный и обменный вклады:

$$\mathcal{F}[\rho(\mathbf{r})] = \mathcal{F}_{id}[\rho(\mathbf{r})] + \mathcal{F}_{ex}[\rho(\mathbf{r})]. \quad (1)$$

Раскладывая  $F_{ex}$  вокруг малого изменения плотности и обрезав на втором терме, соответствующем парной корреляционной функции получим свёртку:

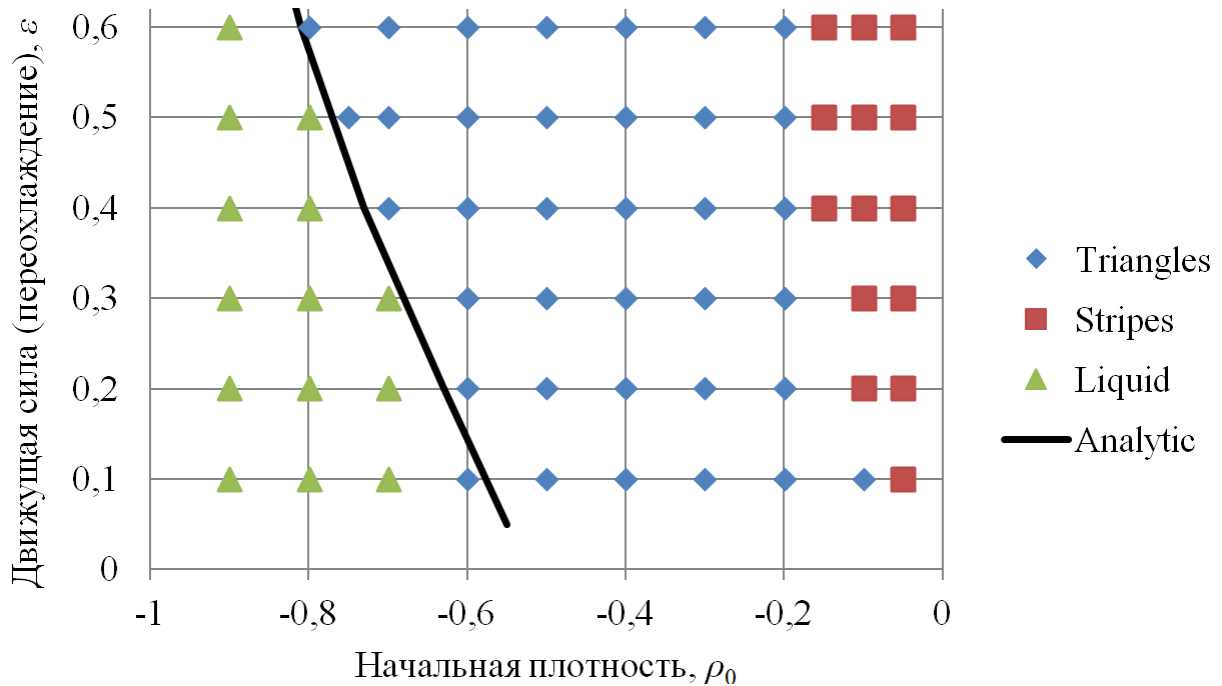
$$\mathcal{F}_{ex} = -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}) C_2 \|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\| n(\mathbf{r}'). \quad (2)$$

Здесь парная корреляционная функция  $C_2$  может быть представлена в виде произвольной интерполированной функции [11], полученной с помощью метода молекулярной динамики или аналитически. Для проверки метода мы рассчитали  $C_2$  через вириальное соотношение:

$$C_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \exp\left(-\frac{U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{k_B T}\right) - 1, \quad (3)$$

где  $U(\mathbf{r})$  – потенциал Леннарда-Джонса 6-12. Через свободную энергию (1) был рассчитан химпотенциал системы, а спомощью динамического уравнения были найдены квазиравновесные

периодические решения. Диаграмма состояний двумерной системы представлена на рисунке для минимума потенциала  $r_m=2$ .



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

#### Литература

1. Elder K.R. et al. Phys. Rev. Lett. **88**, 24. P. 245701, **2002**
2. Provatas N., Elder K. Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. Wiley-VCH. 312 p., **2010**
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. 616 с., **2005**
4. Бразовский С.А. ЖЭТФ. **68**, 1, с. 175–185, **1975**
5. Лебедев В.В., Муратов А.Р. ФТТ, **32**, 3, с. 837–840, **1990**
6. Zhang H., Jiang K., Zhang P. Discret. Contin. Dyn. Syst. - B. **19**, 2. p. 607–627, **2014**
7. Seymour M., Provatas N. Phys. Rev. B. **93**, 3, p. 035447, **2016**
8. Greenwood M., Rottler J., Provatas N. Phys. Rev. E. **83**, 3, **2011**
9. Анкудинов В.Е. и др. ЖЭТФ, **149**, 2, с. 343–356, **2016**
10. Hansen J.-P., McDonald I.R. Theory of Simple Liquids. Elsevier Academic Press. 416 p., **2013**
11. Pisutha-Arnond N. et al. Phys. Rev. E, **87**, 1. p. 1–14, **2013**

## КАРБОНИЗАЦИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Антанович А. А.

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

Углерод–углеродные композиционные материалы (УУКМ) состоят из армирующего каркаса на основе углеродных волокон и углеродной матрицы, формирующейся из углеводородного сырья в процессах пропитки им каркаса и последующих высокотемпературных обработок: карбонизации и графитизации. При этом для достижения необходимой величины плотности материала, от которой зависят его эксплуатационные свойства, указанные процессы повторяются несколько раз.

Независимо от вида агрегатного состояния углеводородных предшественников углеродной матрицы при их карбонизации образуется кокс – твёрдый углеродный остаток, в котором углерод находится в мелкокристаллическом состоянии.

В промышленных технологиях получения УУКМ в качестве прекурсора углеродной матрицы используется каменноугольный пек, представляющий собой набор углеводородных соединений с широким интервалом величин молекулярных масс от 167 до 1500.

Одной из мер оценки эффективности процесса карбонизации, влияющей на достижение требуемой плотности материала, может служить величина выхода кокса после завершения этого процесса. Выход кокса или коксовое число (в %) определяется как отношение массы твёрдого продукта карбонизации к массе загруженного в контейнер каменноугольного пека. Например, коксовое число высокотемпературного пека при проведении карбонизации при атмосферном давлении составляет ~ 60%.

Для повышения коксового числа процесс карбонизации проводят при высоком давлении. Экспериментальные исследования зависимости выхода кокса от максимального давления изостатической карбонизации были проведены нами для высокотемпературного каменноугольного пека. Результаты этих исследований приведены на рисунке 1. Там же показаны уровни коксового числа при атмосферном давлении как для среднетемпературного пека (1), так и для высокотемпературного пека (2).

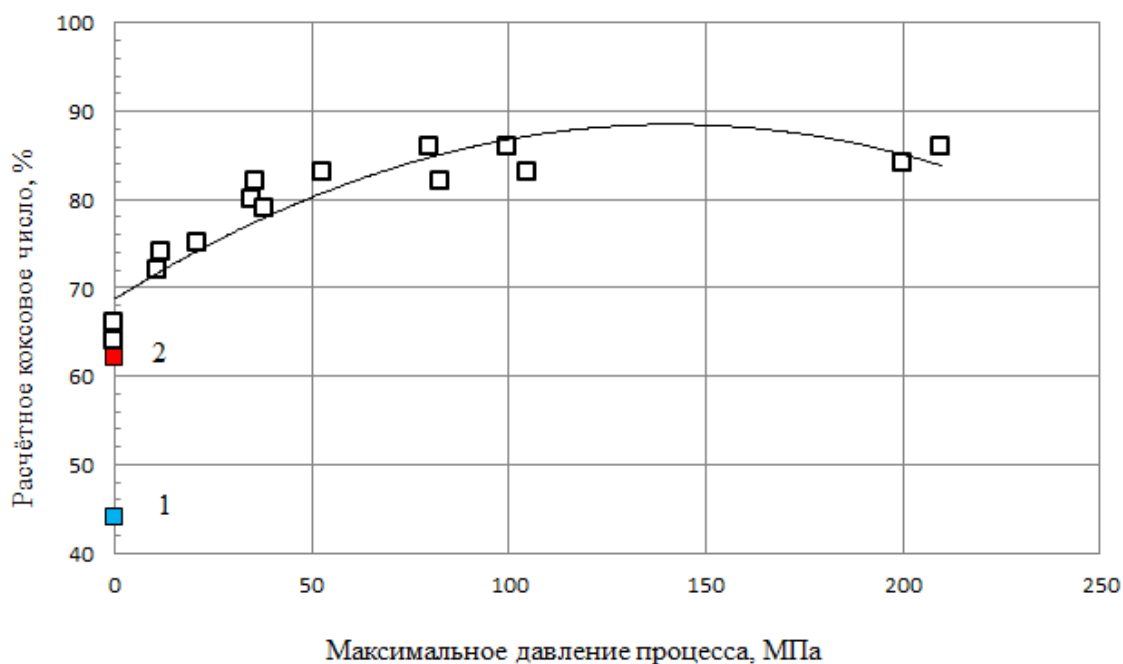


Рисунок 1 - Зависимость коксового числа высокотемпературного каменноугольного пека от давления

Как видно из рисунка эффективное влияние давления при изостатической карбонизации заметно уже на уровне 10 МПа. Коксовое число достигает величины ~86% при давлении 100 МПа, которое является максимальным давлением в промышленной технологии производства ряда УУКМ.

Ранее нами были получена аналитическая выражение для определения количества процессов уплотнения материала для достижения заданной плотности от величины коксового числа [1]. Используя это выражение можно получить, что при проведении процесса карбонизации высокотемпературного каменноугольного пека при давлении 100 МПа для достижения плотности УУКМ 1.95 г/см<sup>3</sup> понадобятся 5 последовательных процессов карбонизации, а при атмосферном давлении – 9 процессов.

#### Литература

1. А. А. Антанович, С. А. Колесников, Сборник материалов Международного симпозиума «Перспективные материалы и технологии», Витебск: УО «ВГТУ», 2019, с. 196-199.

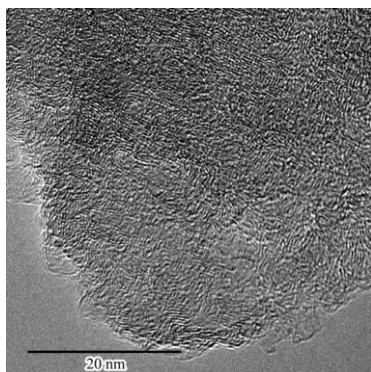
# СТРУКТУРНЫЕ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ УГЛЕРОДОВ В ПРИСУТСТВИИ БОРА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Баграмов Р. Х.

*Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН,  
г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, 14, 108840, Россия  
bagramov@hppi.troitsk.ru*

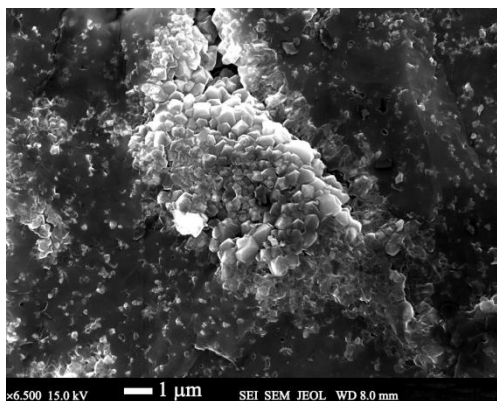
Система бор-углерод достаточно интересна. В последнее время исследовательская активность сместилась в сторону борированных алмазов, обладающих комплексом свойств, обеспечивающих большой потенциал практического использования [1]. Значительно меньше внимание уделяется системам, в которых углерод находится в аморфном или разупорядоченном состоянии. Однако, именно в таких системах может быть реализован потенциал, который имеют структурные состояния углерода, реализуемые при воздействии высоких давлений и температур на фуллерены и которые могут иметь значительную твердость в сочетании с высокой эластичностью.

В докладе приводятся результаты исследования взаимодействия аморфного бора с фуллереном  $C_{60}$  в условиях высоких давлений и температур. Показана последовательность структурных и фазовых превращений, как в области термодинамической стабильности алмаза, так и вне ее, а также связь структуры с упругими модулями. Показано, что для материалов, полученных при 2.0 ГПа, максимум свойств соответствует температурам 900-1000 $^{\circ}$ С, при этом практически отсутствуют кристаллические фазы бора, углерода или их соединений.



Углеродная структурная составляющая образца, полученного из смеси аморфный бор +  $C_{60}$  при 2.0 ГПа/1000 $^{\circ}$ С, состоящая из изогнутых фрагментов с характерным размером менее 5 нм.

При более высоких давлениях обработки в структуре может появляться алмазная составляющая, и упругие модули композита напрямую зависят от ее количества.



СЭМ изображение поверхности скола образца, полученного из смеси аморфный бор + C<sub>60</sub> при 7.7ГПа/1800 °С.

Проведено исследование взаимодействия рентгено-аморфного глобулярного наноуглерода с аморфным бором. Показано, что при соответствующих термодинамических условиях могут быть получены борированные графиты, для которых параметры прямого перехода (давление и температура) в алмаз значительно ниже, чем для высокочистых графитов.

#### Литература

1. S. J. Cobb, Z. J. Ayres, J. V. Macpherson. *Annu. Rev. Anal. Chem.* **11**, 20, 2018
2. R. Kh. Bagramov, N. R. Serebryanaya, V. M. Prokhorov, V. D. Blank, *Technical Physics*, **63**, 7, 2018

### РАЗРАБОТКА МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ СПЛАВА TiZrHfNb МЕТОДАМИ ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Балякин И. А.<sup>1,2</sup>, Рыльцев Р. Е.<sup>1,2</sup>, Ремпель А. А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт Металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург*

<sup>2</sup>*Уральский Федеральный Университет, г. Екатеринбург*

*i.a.balyakin@gmail.com*

Разработка межатомных потенциалов взаимодействия является важной задачей вычислительного материаловедения. Корректный потенциал позволяет рассчитать структурные, динамические и термодинамические характеристики материалов в определённом диапазоне термодинамических параметров. В течение долгого времени, задача построения межчастичного потенциала, сводилась к определению коэффициентов для некоторой функции фиксированного вида (парный потенциал, EAM и т.д.) исходя из экспериментальных наблюдений или квантово-химических расчетов.

В последнее время, набирают популярность методы разработки межатомных потенциалов на основе машинного обучения. Одним из таких методов является DeePMD, описанный в [1]. В рамках данного метода, набор *ab initio* конфигураций, наряду с их энергиями и силами, действующими на каждый атом в данной конфигурации, используется для тренировки многомерной нейронной сети, аппроксимирующей поверхность потенциальной энергии изучаемой системы. Такой нейросетевой потенциал позволяет достичь точности аппроксимации межатомных сил близкой к точности первопринципных расчетов при на порядок меньших вычислительных затратах.

Своего рода «вызовом» для разработки нейросетевых потенциалов являются высокоэнтропийные сплавы, относительно новый класс многокомпонентных материалов с интересными свойствами. В твердом состоянии данные сплавы чаще всего представляют неупорядоченный твердый раствор замещения [2]. Это приводит к необходимости использования в расчетах больших сверхъядер как для твердого, так и для жидкого состояний. Использование больших сверхъядер затруднительно в *ab initio* методах, и, таким образом, возникает необходимость разработки классических потенциалов для данных систем. В силу большого числа компонентов в данных системах параметризация традиционных EAM потенциалов является крайне сложной задачей. Подход, основанный на машинном обучении, является более перспективным, хотя и на этом пути имеются сложности технического характера.

В данной работе был разработан DeePMD-потенциал для многокомпонентного расплава TiZrHfNb. Тренировка нейросети осуществлялась с использованием траекторий, полученных методом *ab initio* молекулярной динамики (AIMD), реализованной в пакете VASP. Сравнение парциальных радиальных функций распределения, полученных AIMD и классической молекулярной динамикой с использованием DeePMD-потенциала показало хорошее согласие. Полученные результаты говорят о том, что метод DeePMD как минимум может быть использован для эффективного расчета структурных характеристик расплавов многокомпонентных систем, в частности высокоэнтропийных сплавов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 19-73-20053).

#### Литература

1. L. Zhang *et al*, Phys. Rev. Lett., **120**, 14, **2018**
2. Y. Zhang *et al*, Adv. Eng. Mater., **10**, 6, **2008**



## СТРУКТУРА, СТАБИЛЬНОСТЬ И ЛОВУШКИ ЗАРЯДА В НАНОКЛАСТЕРАХ $Cd_nSe_m$

Батурин В. С.<sup>1,2</sup>, Лепешкин С. В.<sup>1,2</sup>, Бушланова Н. А.<sup>2,3</sup>,  
Успенский Ю. А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Сколковский институт науки и технологий, ул. Нобеля 3,  
143026 Москва*

<sup>2</sup>*Физический институт им. П. Н. Лебедева, Ленинский пр. 53,  
119991 Москва*

<sup>3</sup>*Московский физико-технический институт, Институтский  
переулок, д.9., 141701 г. Долгопрудный, Московская область,  
v.baturin@skoltech.ru*

Нанокластеры (НК) и квантовые точки активно исследуются в связи с их применением в фотовольтаике, оптоэлектронике, биомедицине других областях. Их эффективность в качестве оптоэлектронных устройств критически зависит от концентрации электронных ловушек, которые приводят к безызлучательной рекомбинации, низкому квантовому выходу и замедлению зарядового транспорта. Наличие ловушек во многом обусловлено структурными дефектами и определенными группами атомов на поверхности НК. Пассивация поверхности лигандами или диэлектрической оболочкой устраняет ловушки и улучшает свойства НК, повышая квантовый выход от нескольких процентов (чистый CdSe) до 90% в случае двухслойной CdSe-CdS частицы. Однако для многих применений важно оставлять частицу проводящей. Для таких случаев допирование должно производиться более прицельно, что приводит к необходимости более глубокого понимания механизмов работы электронных ловушек.

В настоящей работе мы произвели систематическую глобальную структурную оптимизацию для 225 кластеров  $Cd_nSe_m$  с  $1 \leq n, m \leq 15$ . Полученные результаты позволили провести масштабное исследование условий формирования ловушек. Обнаружено, что стабилизация атомной структуры существенно уменьшает число ловушек, так, что только 5% из рассчитанных кластеров имеют локализованные состояния на верхней заполненной (HOMO) и нижней незаполненной (LUMO) оболочках. Спектральное распределение внутрищелевых состояний показало, что в среднем ловушки отстоят на 0.5 эВ от краев зон, что согласуется с экспериментальными работами [1]. Кроме того, ловушки

присутствуют и внутри зон, что невозможно в твердых телах и связано с большой долей поверхностных атомов. Нами была разработана классификация, систематизирующая множество найденных ловушечных состояний. Эта классификация тесно связана с тремя обнаруженными механизмами локализации, существенно расширяющими известную ранее картину [2]: (а) известный механизм, связанный с симметрией орбиталей, (b) механизм, связанный с разностью энергий  $\pi$ - и  $\sigma$ -связи и (с) пространственная изоляция атома Cd в полости НК. Кроме того, было исследовано влияние ловушек на ширину НОМО-LUMO щели. Оказалось, внутрищелевое расположение ловушек почти в точности компенсирует увеличение щели за счет кулоновского взаимодействия, обусловленного локализацией.

Работа выполнялась при поддержке РФФ (грант №19-72-30043) и РФФИ ( грант №19-02-00394)

#### Литература

1. Boehme, S. C. *et al.*, *Nano Letters* **15**(5), 3056–3066 **2015**
2. Houtepen A. J. *et al.*, *Chem. Mater.* **29**, 752–761 **2017**

### **ВЛИЯНИЕ ФУГИТИВНОСТИ КИСЛОРОДА НА ФАЗООБРАЗОВАНИЕ В СИСТЕМЕ Ti-Al-Zr-O**

Беккер Т. Б.<sup>1</sup>, Литасов К. Д.<sup>2</sup>, Шацкий А. Ф.<sup>1</sup>, Крашенинников С. П.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН*

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

<sup>3</sup>*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН*  
*bekker@igm.nsu.ru, t.b.bekker@gmail.com*

Фазообразование в системе Ti-Al-Zr-O было исследовано в трех различных окислительно-восстановительных условиях [1]. Образцы были охарактеризованы методами порошковой рентгеновской дифракции, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (SEM/EDS). Отжиг Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-содержащих составов в герметичных платиновых капсулах на воздухе при 1600 °С приводит к полному окислению трехвалентного титана до четырехвалентного состояния. Образующиеся фазы соответствуют схеме триангуляции системы TiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> при 1600 °С. Окислительно-восстановительные условия в высокотемпературной вертикальной трубчатой печи

Nabertherm® RHTV при 1 атм газовой смеси Ar : CO<sub>2</sub> : H<sub>2</sub> на 2 логарифмических единицы ниже буфера железо-вюстит соответствуют полю стабильности соединения AlTi<sub>2</sub>O<sub>5</sub> с соотношением оксидов титана TiO<sub>2</sub> : Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = 2 : 1. Впервые получен и охарактеризован монофазный образец AlTi<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Тройное соединение Ti-Al-Zr синтезировали в вакуумированной кварцевой ампуле, что сопровождалось извлечением кремния из ампулы; средняя концентрация SiO<sub>2</sub> в соединении составила 4.1(3) моль. %. Согласно уточнению микрофокусной рентгенограммы методом Ритвельда и анализам SEM/EDS, тройное соединение имеет кубическую структуру типа пирохлора M1<sup>3+</sup><sub>2</sub>M2<sup>4+</sup><sub>2</sub>O<sub>7</sub> и состав (Ti<sup>4+</sup><sub>1,47(2)</sub>Zr<sub>0,41(2)</sub>Si<sub>0,12(1)</sub>)<sub>2</sub>(Al<sub>1,15(4)</sub>Ti<sup>3+</sup><sub>0,85(4)</sub>)<sub>2</sub>O<sub>7</sub>. Проведен рентгеноструктурный анализ монокристаллов β-(Zr<sub>x</sub>Ti<sub>1-x</sub>)<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, полученных с использованием флюса.

#### Литература

1. Bekker T.V., et al. J. Eur. Ceram. Soc., **40**, 10, **2020**

## РАЗЛОЖЕНИЕ ГИЗБУРГА-ЛАНДАУ ДЛЯ МНОГОЗОННЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

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 во внешнем поле при температурах, близких к критическим. Известно, что в стационарных случаях поведение параметра порядка в такой системе хорошо описывается уравнением Гинзбурга-Ландау. В частности, для многозонных сверхпроводников [1, 2] это уравнение имеет форму

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

Здесь  $A^\gamma, B^\gamma, K^\gamma$  – некоторые размерные параметры системы, индексы  $\alpha, \gamma$  нумеруют электронные зоны,  $\Delta^\gamma(\mathbf{r})$  – параметр порядка,  $g_{\gamma\alpha}^{-1}$  – обратная матрица для матрицы констант связи взаимодействия БКШ. Это уравнение можно получить из уравнения самосогласования на параметры порядка, используемое в микроскопической теории сверхпроводимости:

$$\sum_{\alpha} g_{\gamma\alpha}^{-1} \Delta^{\alpha}(\mathbf{r}) = \int \frac{d\Omega}{2\pi i} F^{<\gamma}(\Omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}).$$

Если использовать разложение функций Грина по  $\Delta^\gamma(\mathbf{r})$  и  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  до третьего порядка, то можно получить следующие выражения для коэффициентов:

$$\begin{aligned} A^\gamma &\approx v_f^\gamma \epsilon_d \frac{dN(0)}{d\varepsilon} = -\frac{v_f^\gamma \epsilon_d}{4T}, \\ K^\gamma &= -v_f^\gamma (v_f^\gamma)^2 \int d\varepsilon \frac{2N(\varepsilon) - 1}{(2\varepsilon - i0)^3} + \frac{v_f^\gamma}{2m^\gamma} \int d\varepsilon \frac{2N(\varepsilon) - 1}{(2\varepsilon - i0)^2}, \\ B^\gamma &= \frac{1}{2} v_f^\gamma \int d\varepsilon \left( \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon^2} - \left( N^\gamma(\varepsilon) - \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\varepsilon^3} \right). \end{aligned}$$

Здесь  $v_f^\gamma$  – плотность состояний зоны  $\gamma$  на уровне Ферми,  $v_f^\gamma$  – усредненная по направлениям скорость Ферми,  $\epsilon_d$  – энергия обрезания в модели БКШ,  $N(\varepsilon)$  – числа заполнения состояний для распределения Ферми.

Вывод уравнения Гинзбурга-Ландау из микроскопической теории существенно содержит в себе факт, что внешние поля не зависят от времени. Существует феноменологическое обобщение этого уравнения на случай нестационарных полей, однако оно применимо только для бесщелевых сверхпроводников с магнитными примесями [3]. Тем не менее, для очень медленно изменяющихся полей мы можем предположить, что разложение по параметрам порядка может давать некоторое новое уравнение, которое может быть нелокальным по времени и должно переходить к уравнению Гинзбурга-Ландау для стационарных полей.

Можно получить, что в линейном порядке по параметру порядка выполняется

$$\begin{aligned} F^{<\gamma}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}, t) &\approx a \frac{\partial}{\partial t} \Delta^\gamma(\mathbf{r}, t) + A^\gamma \Delta^\gamma(\mathbf{r}, t) \\ &+ K^\gamma \left( -i\nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 \Delta^\gamma(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Однако при разложении до кубического члена по параметру порядка возникают некоторые проблемы. В частности, для чистого сверхпроводника любое возмущение параметра порядка бесконечно долго влияет на параметры системы, а также отсутствует предельный переход к стационарному случаю. Очевидно, для корректного подсчета необходим учет беспорядка в системе, что мы и планируем сделать в дальнейшем.

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

#### Литература

1. M. Silaev and E. Babaev, Phys. Rev. B, **85**, 13, **2012**
2. Orlova, N. V., et al., Phys. Rev. B, **87**, 13, **2013**
3. L. P.Gor'kov and G. M. Eliashberg, Zh. Eksp. Teor. Fiz., **54**, 612, **1968**

### ПЕРЕХОД ОРБИТАЛЬНЫЙ ПОРЯДОК – ОРБИТАЛЬНЫЙ БЕСПОРЯДОК В $\text{LaMnO}_3$ ПО ДАННЫМ ЯМР $^{17}\text{O}$ И $^{139}\text{La}$

Волкова З. Н., Геращенко А. П., Верховский С. В.,  
Михалев К. Н., Гермов А. Ю.

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

Магнитный оксид  $\text{LaMnO}_3$ , являющийся исходным для целого ряда перовскитоподобных манганитов с переменной валентностью, можно рассматривать как идеальный модельный объект для изучения взаимосвязи электронной, решеточной и магнитной подсистем данных соединений. Наличие в  $\text{LaMnO}_3$  только ян-теллеровских ионов  $\text{Mn}^{3+}$  приводит к коллективному эффекту Яна-Теллера, следствием которого является упорядочение орбиталей марганца ниже  $T_{JT} = 750$  К [1]. Выше этой температуры дальний орбитальный порядок разрушается. В настоящей работе изучен фазовый переход орбитальный порядок – орбитальный беспорядок в исходном  $\text{LaMnO}_3$  методами ЯМР  $^{17}\text{O}$  и  $^{139}\text{La}$ .

$\text{LaMnO}_3$  имеет орторомбическую структуру с пространственной группой симметрии  $Pbnm$ . ЯМР на ядрах  $^{139}\text{La}$  дает информацию о магнитном и зарядовом окружении, создаваемом суммарно восемью ближайшими ионами марганца. Ядра  $^{17}\text{O}$  «чувствуют» локальные поля, наводимые различными парами спинов марганца ( $\text{O1}$  – вдоль

оси  $c$  и O2 – в плоскости  $ab$ ). Таким образом, по данным ЯМР  $^{17}\text{O}$  можно получить более детальную информацию об обменных взаимодействиях в различных кристаллографических направлениях.

Спектры  $^{139}\text{La}$  хорошо описываются линией с одним набором параметров тензора магнитного сдвига и тензора градиента электрического поля как ниже, так и выше точки орбитального упорядочения. Это говорит эквивалентности всех позиций лантана в кристаллической решетке. Температурная зависимость изотропного сдвига лантана описывается обобщенным законом Кюри-Вейсса  $^{139}K = K_0 + C/(T - \Theta)$  со значениями  $\Theta_1 = 55(6)$  К и  $\Theta_2 = 160(20)$  К ниже и выше температуры перехода соответственно. Скачок величин  $\Theta$  свидетельствует об изменении характера обменного взаимодействия между спинами соседних ионов марганца при переходе через точку орбитального упорядочения, а именно о резком росте ферромагнитного вклада выше  $T_{JT}$ .

В спектрах ЯМР  $^{17}\text{O}$  наблюдаются две линии, обусловленные сигналом от ядер кислорода в позициях O1 и O2. В температурной области  $180 \text{ К} < T < T_{JT}$  поведение сдвига для позиции O2 хорошо описывается законом Кюри-Вейсса с положительным значением  $\Theta = 35(10)$  К. Это означает преобладание ферромагнитного вклада в суперобменное взаимодействие в плоскости  $ab$ . В отличие от O2, сдвиг, соответствующий позиции O1, имеет более сложную температурную зависимость. Для позиции O1 закон Кюри-Вейсса выполняется только при  $T < 550$  К с отрицательным знаком  $\Theta = -15(10)$  К, что говорит об антиферромагнитном типе корреляций между спинами ионов Mn вдоль оси  $c$ . Наличие одной линии ЯМР выше точки перехода свидетельствует о том, что две структурно неэквивалентные позиции кислорода имеют одинаковое магнитное окружение. Анализ зависимости  $^{17}K(T > T_{JT})$  дает значение  $\Theta(\text{O1}, \text{O2}) = 260(50)$  К. Таким образом, при фазовом переходе орбитальный порядок – орбитальный беспорядок анизотропный характер Mn–Mn обменного взаимодействия меняется на изотропный ферромагнитный.

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

#### Литература

1. J. S. Zhou, J. B. Goodenough, Phys. Rev. B, **60**, R15002, 1999

## ТЕПЛООБМЕН В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПРОПИЛЕНГЛИКОЛЕЙ И ПОЛИПРОПИЛЕНГЛИКОЛЕЙ: ИМПУЛЬСНЫЙ ПЕРЕГРЕВ И СПИНОДАЛЬНЫЙ РАСПАД

Волосников Д. В.<sup>1</sup>, Поволоцкий И. И.<sup>1</sup>, Васин М. Г.<sup>2,4</sup>, Сон Л. Д.<sup>3,4</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>*Уральский государственный педагогический университет*

<sup>4</sup>*УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина*

*dima\_volosnikov@mail.ru*

При импульсном нагреве водных растворов исследуются особенности теплообмена и начальные стадии фазовых переходов двух типов: жидкость-пар и жидкость-жидкость (нуклеация и/или спинодальный распад [1]). Во всем диапазоне концентраций изучен перенос тепла в трех водных растворах пропиленгликолей, перегретых относительно температуры равновесия жидкость-пар. Для двух растворов полипропиленгликолей определены диффузионная спинодаль и условия спинодального распада в зависимости от глубины захода в область неустойчивых состояний раствора. В частности, выявлен диапазон концентраций со значительной интенсификацией теплообмена.

Цель работы – сопоставление интенсивности теплообмена в импульсно нагреваемых однородных и расслаивающихся растворах, в том числе, на начальной стадии спинодального распада.

В абсолютно устойчивых состояниях, при неизменных внешних параметрах интенсивность теплообмена в системе нагреватель-теплоноситель определяется свойствами самой системы и является прогнозируемой. Процессам с мощным локальным тепловыделением в растворах с нижней критической температурой растворения (НКТР) свойственны переходы через линии равновесия жидкость-пар, жидкость-жидкость и, в некоторой области фазовой диаграммы, через диффузионную спинодаль, где свойства растворов не известны [2].

В эксперименте использована автоматизированная установка, реализующая метод управления мощностью нагрева проволочного зонда – термометра сопротивления. Работа основана на принципе контроля теплового воздействия на систему «нагреватель-вещество» с одновременной регистрацией соответствующего отклика от нагреваемого вещества [3].

В условиях кратковременного импульсного нагрева зонда в веществе регистрируется тепловой поток через поверхность зонда [4]. При нагреве температура зонда увеличивается от начального значения  $T_0$  до заданного значения  $T_{st}(t_2 > t_1) \approx const$  за время порядка  $t_1 \sim 0.1$  мс и в дальнейшем поддерживается в течении  $t_2 \sim 0.1$  с. Значения температуры зонда  $T_{st}(t)$ , и электрической мощности  $P(t; T_{st})$ , необходимой для её поддержания, рассчитываются на основе регистрируемых значений падения напряжения на зонде и стандартном резисторе. По результатам измерений рассчитывается коэффициент теплоотдачи к образцу при заданной температуре  $T_{st}$ :

$$K_T(t) = P(t)/((T_{st}(t)-T_0) \cdot S_w), \text{ где } S_w - \text{площадь зонда.}$$

Данный метод удобен при сопоставлении тепловых свойств образцов, в том числе при изменении концентрации раствора, как в области устойчивых состояний вещества, так и в области перегретых (короткоживущих) состояний.

В полном диапазоне концентраций исследован перенос тепла в водных растворах монопропиленгликоля, дипропиленгликоля и трипропиленгликоля, перегретых относительно температуры равновесия жидкость-пар. Обнаружено свойственное данному типу растворов отрицательное отклонение тепловой проводимости вдоль оси концентрации от аддитивного закона. Для водных растворов PPG-425 и PPG-725 рассчитаны значения температуры на спинодали, сопоставлены коэффициенты теплоотдачи в случае их перегрева относительно линий равновесия жидкость-пар и жидкость-жидкость. Определены условия спинодального распада и обнаружена резкая интенсификация теплообмена при разделении исходно гомогенного раствора по механизму спинодального распада. Изученные растворы перспективны в качестве теплоносителей в миниатюрных системах с мощным локальным тепловыделением.

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

#### Литература

1. В.П. Скрипов, А.В. Скрипов, Успехи физических наук, **128**, 6, **1979**
2. P.V. Skripov, S.E. Puchinskis, J. Appl. Polym. Sci, **59**, **1996**
3. П.В. Скрипов, А.А. Старостин, Д.В. Волосников, Доклады РАН. **390**, 2, **2003**
4. D.V. Volosnikov, I.I. Povolotskiy, A.A. Igolnikov, D.A. Galkin, J. Phys.: Conf. Ser., **1105**, 012153, **2018**



## ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В $\text{CaCO}_3$ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Гаврюшкин П. Н.<sup>1,2</sup>, Литасов К. Д.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт Геологии и Минералогии им В.С. Соболева СО РАН

<sup>2</sup>Новосибирский Государственный Университет

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

*gavryushkin@igm.nsc.ru*

Фазовая Р-Т диаграмма карбоната кальция, вероятно, является одной из самых сложных диаграмм среди всех простых карбонатов. Многочисленные фазовые переходы, сопровождающиеся совместным образованием нескольких, как стабильных, так и метастабильных фаз, динамическое разупорядочивание молекулярных групп  $\text{CO}_3$ , а также влияние дефектной структуры кристалла существенно ограничивает экспериментальные возможности в определении кристаллических структур высокобарических фаз. Это послужило стимулом к активному использованию *ab initio* методов предсказания структур и молекулярной динамики. В настоящей работе мы представляем обзор наших теоретических и экспериментальных результатов по высокобарическим и высокотемпературным переходом карбоната кальция, включающих:

- 1) открытие эффектов динамического разупорядочивания в структуре арагонита при давлениях 3-10 ГПа методами молекулярной динамики и с последующим анализом экспериментальных данных;
- 2) открытие новых фаз  $\text{CaCO}_3$ -VII и арагонит-II с помощью совместного использования методов предсказания структур и *in situ* экспериментов в алмазной ячейке;
- 3) экспериментальное подтверждение перехода углерода от треугольной к тетраэдрической координации при давлениях порядка 100 ГПа;
- 4) открытие методами молекулярной динамики гексагонального арагонита – метастабильной фазы, вероятно, образующейся при превращении арагонита в кальцит;
- 5) установление роли дефектной структуры арагонита на его фазовые переходы, методами молекулярной динамики и просвечивающей электронной микроскопии;

б) установление политипизма в кальците, также с помощью первопринципных методов и методов просвечивающей электронной микроскопии.

Методами молекулярной динамики было показано, что подобно кальциту, арагонит при нагревании также будет переходить в разупорядоченное состояние, в котором атомы кислорода не имеют фиксированного положения и  $\text{CO}_3$  группы совершают свободное вращение вокруг оси третьего порядка, проходящей через центр треугольника [1]. Разупорядоченная фаза стабилизируется в интервале давлений 3-9 ГПа при температурах выше 1600 К (рис 1а). Наличие двойниковых границ в структуре арагонита понижает температуру разупорядочивания на температуру 100–400 К – линия перехода  $\text{O}_2$ -дисараг на рис.1а. Полученные результаты моделирования находятся в соответствии с заключочными экспериментами. *In situ* эксперименты подтверждают наличие фазового перехода в этой области, сопровождающегося исчезновением большинства пиков дифрактограммы.

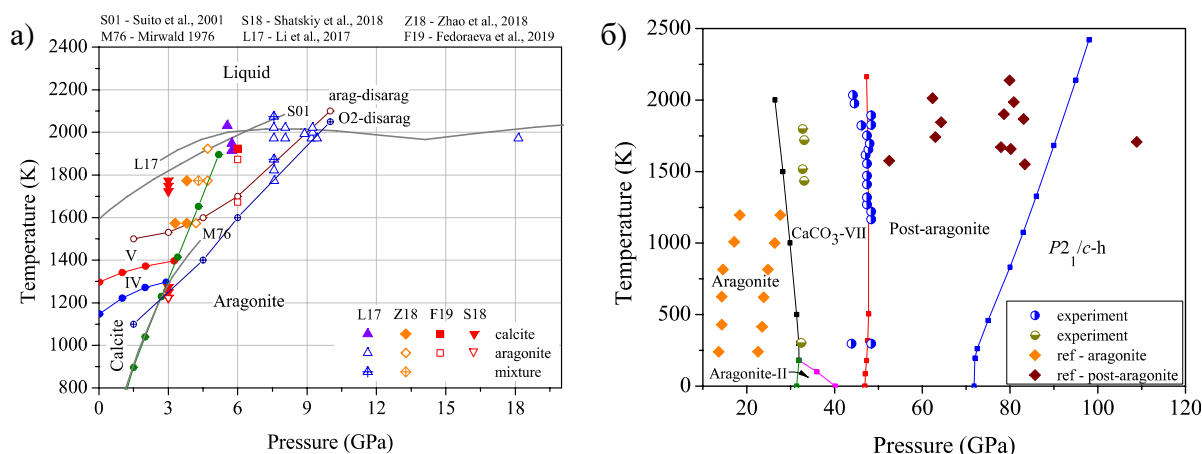


Рис.1. Фазовые диаграммы  $\text{CaCO}_3$

Обнаруженная нами экспериментально фаза  $\text{CaCO}_3$ -VI [2] является модификацией фазы  $\text{CaCO}_3$ - $P2_1/c$ , предсказанной в работе [1]. Также с помощью эволюционных алгоритмов нами была предсказана структура арагонит-II (рис.1 б). Расчёт энергии Гиббса в рамках квазигармонического приближения свидетельствует об ограниченной температурной стабильности этой фазы (<200 К). Полученные результаты по структурам арагонита-II и  $\text{CaCO}_3$ -VII позволили провести удовлетворительное индексирование пиков экспериментальной дифрактограммы. Фазовые границы на P-T

диаграмме, определённые в рамках квазиграмонического приближения, находятся в полном соответствии с экспериментом.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№18-35-20047).

#### Литература

1. Gavryushkin et al., under review 2020
2. P.N. Gavryushkin et al., Cryst. Growth Des., **17**, 12, **2017**
3. C. Pickard et al., PRB, **91**, 10, **2015**

## **МНОГОКРАТНОЕ ВОЗВРАТНОЕ ПЛАВЛЕНИЕ В ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЕ СФЕР ГЕРЦА С ЕДИНСТВЕННОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗОЙ**

Гайдук Е. А., Рыжов В. Н., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н.  
*Институт физики высоких давлений РАН им. Верецагина*  
*gaiduk.evgeniy@gmail.com*

Хорошо известно, что двумерные системы с потенциалом межчастичного взаимодействия вида  $U(r) = (1 - r/\sigma)^\alpha, r \leq \sigma$  (потенциал Герца) обладают разнообразием кристаллических фаз при небольших значениях параметра  $\alpha$  [1, 2]. Для таких систем характерны многочисленные максимумы на кривой плавления, смена сценариев двумерного плавления, структурные переходы между разными типами кристаллических решеток, существование устойчивых квазикристаллических фаз, возвратное плавление, водоподобные аномалии плотности, диффузии [3, 4]. С увеличением параметра  $\alpha$  уменьшается разнообразие кристаллических фаз, и далее, со значения  $\alpha \approx 3$ , единственной устойчивой двумерной кристаллической решеткой является треугольная (гексагональная), однако несмотря на это, максимумы на кривой плавления сохраняются.

В данной работе представлено исследование методом молекулярной динамики двумерной системы с потенциалом Герца с параметром  $\alpha = 3.5$  [5]. Демонстрируется фазовая диаграмма с единственной устойчивой кристаллической решеткой (треугольной) и несколькими последовательными максимумами кривой плавления. Подробно изучено плавление треугольного кристалла в области низких плотностей, включающей первый максимум кривой

плавления. В частности, основываясь на расчете уравнения состояния и корреляционных функций параметров порядка, установлено наличие двух сценариев плавления с промежуточной гексатической фазой. Показано, что существует трикритическая точка, в которой происходит смена одного сценария на другой. Кроме того, впервые достаточно точно посчитана теплоемкость при двумерном плавлении, и обсуждаются проблемы, связанные с ее расчетом. В системе также были обнаружены несколько областей с аномалиями плотности и диффузии. Продемонстрирована явная корреляция этих областей с участками, на которых наблюдается возвратное плавление.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (проект №19-12-00092).

#### Литература

1. M. Zu, P. Tan, N. Xu, Nat. Comm., **8**, 2089, **2017**.
2. L. Miller, A. Cacciuto, Soft Matter, **7**, 7552, **2011**.
3. Yu. D. Fomin, E. A. Gaiduk, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Molecular Physics, **116**, 3258, **2018**.
4. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН, **190**, 449, **2020**
5. E. N. Tsiok, E. A. Gaiduk, Yu. D. Fomin, V. N. Ryzhov, Soft Matter, **16**, 3962, **2020**

## ПРЯМАЯ ОЦЕНКА КИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ ЖИДКОСТЯХ

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

*Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань  
bulatgnmail@gmail.com*

Скорость перехода частиц  $g^+$  из жидкости в кристаллическую фазу и скорость отсоединения частиц  $g^-$  от кристаллического зародыша являются основными кинетическими скоростными факторами в теории нуклеации [1]. Прямое экспериментальное измерение этих величин для кристаллизующейся объемной системы является очень сложной задачей. Это связано с трудностями отслеживания траекторий отдельных атомов на наноразмерных масштабах. Скорость пристегивания  $g^+$  может быть рассчитана косвенными методами, например, основанными на уравнениях Турнбулла или Келтона с использованием экспериментально

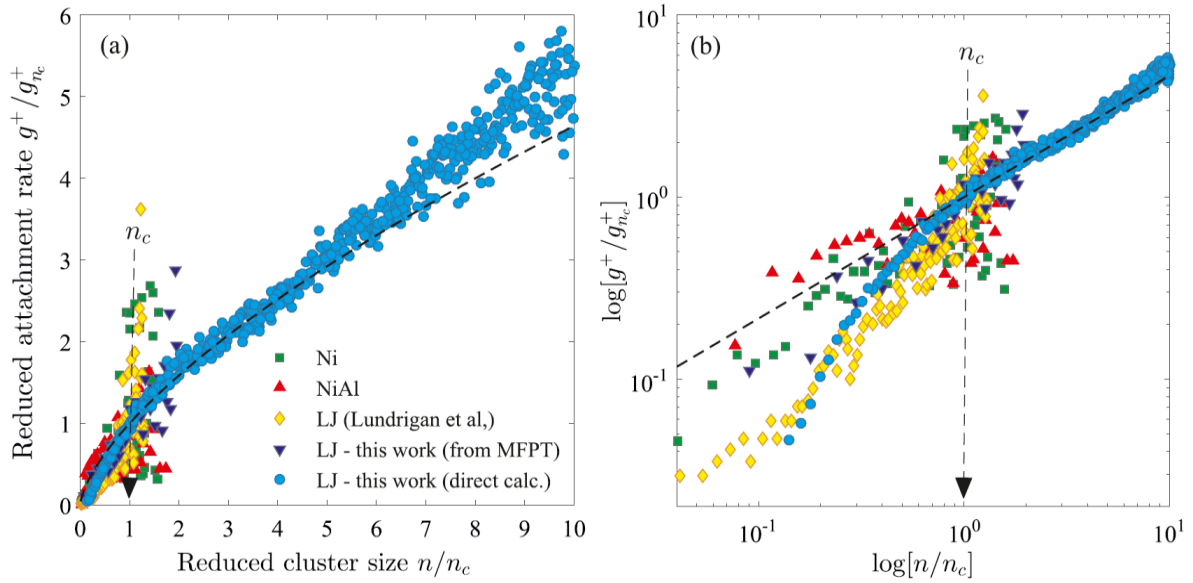


Рисунок 1. (а) – Приведенная скорость пристегивания  $g^+/g_{n_c}^+$  как функция приведенного размера зародыша  $n/n_c$ . Наши результаты сравниваются с данными моделирования, полученными для кристаллизующейся LJ-системы из работы [3], а также для кристаллизующихся систем Ni и NiAl [4]. (б) - Зависимость  $g^+/g_{n_c}^+$  от  $n/n_c$  в двойной логарифмической шкале. Пунктирная кривая получена по формуле (1).

измеренного коэффициента самодиффузии или вязкости [2]. Другим наиболее доступным способом оценки скорости  $g^+$  является использование метода моделирования молекулярной динамики.

В настоящей работе мы предлагаем простой и точный подход к прямой оценке кинетических скоростных факторов  $g^+$  и  $g^-$ . В соответствии с этим подходом вычисления выполняются на основе данных моделирования молекулярной динамики без использования модельных функций и подгоночных параметров.

В настоящей работе расчеты выполнены на примере кристаллизующейся переохлажденной системы Леннард-Джонса (LJ) при температуре  $T = 0.5\epsilon/k_B$  и при изобаре  $p = 2.0\epsilon/\sigma^3$  (здесь  $\epsilon$  и  $\sigma$  – параметры потенциала,  $k_B$  – постоянная Больцмана). Мы находим, что для растущих кристаллических зародышей, размеры которых больше критического размера  $n_c$ , зависимость величин  $g^+$  и  $g^-$  от размера зародыша  $n$  следует по степенному закону [см. Рисунок 1 а]

$$g^+(n) = g_{n_c}^+ \left(\frac{n}{n_c}\right)^{2/3} \quad (1)$$

Здесь  $n_c$  – есть критический размер, который для системы в рассматриваемом  $(p, T)$  состоянии равен  $\approx 50$  частицам. Скорость пристегивания частиц к зародышу критического размера составляет  $g_{n_c}^+ \approx 488\tau^{-1}$  ( $\tau$  - единица времени).

В случае режима субнуклеации, когда размер зародышей меньше чем  $n_c$ ,  $n$ -зависимость величины  $g^+$  сильно зависит от микроскопических свойств системы, и эта зависимость не может быть описана в рамках какого-либо универсального закона (например, степенного закона) [см. Рисунок 1 b].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 19-12-00022).

#### Литература

1. D. Kashchiev, Nucleation: Basic Theory with Applications (Butterworth-Heinemann, Oxford, **2000**)
2. А. В. Мокшин, Б. Н. Галимзянов, Д. Т. Яруллин, Письма в ЖЭТФ, **110**, 498, **2019**
3. S. E. M. Lundrigan, I. Saika-Voivod, J. Chem. Phys., **131**, 104503, **2009**
4. H. Song, Y. Sun, F. Zhang, C. Z. Wang, K. M. Ho, M. I. Mendeleev, Phys. Rev. Materials, **2**, 023401, **2018**

### **АНОМАЛЬНОЕ ИЗМЕНЕНИЕ РАЗМЕРА СПИНОВОГО ПОЛЯРОНА В ПАРАМАГНИТНОЙ ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР В ДВОЙНОМ ПЕРОВСКИТЕ $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$**

Гудин С. А., Солин Н. И.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского  
отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия  
gudin@imp.uran.ru*

Данная работа продолжает магнитные и электрические исследования соединения  $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$  [1-3]. Представлены результаты расчетов магнитосопротивления для магнитных полей от 0 до 90 кОе и температур от 5 до 90 К на основе учета двух механизмов проводимости, — «ориентационного» и «спин-поляронного» [4-7]. Магнитосопротивление определяется изменением размеров и направлений магнитных моментов магнитных неоднородностей (спиновых полярнов). Под спиновыми полярнами

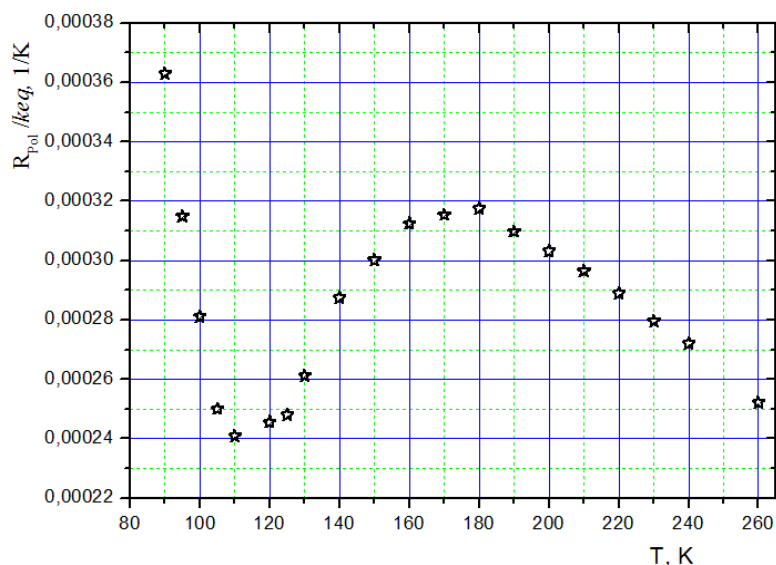


Рис. 1. Размер спинового полярона отнесенного к  $keq$  в зависимости от температуры  $T$ .

понимаются квазичастицы, описывающие ферромагнитные зарядовые неоднородности нанометровых размеров. Удельное сопротивление определяется прыжковой проводимостью носителей с одного спинового (ферромагнитного) полярона на соседний [4-5]. Сами спиновые поляроны считаются малоподвижными, так как они запинингованы зарядовыми неоднородностями, возникающими из-за разной валентности ионов  $La^{3+}$  и  $Sr^{2+}$ , находящихся на эквивалентных кристаллических позициях. Размер спинового полярона увеличивается как с ростом приложенного магнитного поля, так и уменьшением температуры. Величина энергетического барьера обратно пропорциональна размеру спинового полярона. Показано, что величина колоссального магнитосопротивления обеспечивается за счет увеличения (вдоль приложенного внешнего магнитного поля) линейного размера полярона. В работе обнаружено рис.1 аномальное изменение размера спинового полярона  $R_{pol}$  в парамагнитной области температур. На рис. 1 в отсутствии внешнего магнитного поля приведено изменение размера спинового полярона, отнесенного к  $keq$ , в зависимости от температуры  $T$ . Здесь  $k$  – коэффициент пропорциональности в законе Кулона, определяемый через диэлектрическую проницаемость спинового полярона,  $e$ ,  $q$  – заряды электрона и полярона. В отсутствии магнитного поля, обнаруженный пик максимален, с включением магнитного поля высота пика уменьшается. В поле 20 кЭ пик исчезает, переходя в точку перегиба на температурной кривой размера спинового полярона. В магнитных

полях больше 30 кЭ аномальное температурное поведение размера полярона полностью пропадает. Предложены механизмы, объясняющие такое аномальное температурное поведение размера спинового полярона.

Авторы благодарят К. И. Кугеля за ценные замечания, сделанные при обсуждении результатов этой работы.

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, Н.И. Солин, Н.Н. Гапонцева, ФТТ **60**, 6, 1067, **2018**
2. С.А. Гудин, Н.И. Солин, ФТТ **62**, 5, 669, **2020**
3. С.А. Гудин, Н.И. Солин, ЖЭТФ **157**, 4, 648, **2020**.
4. A.L. Rakhmanov, K.I. Kugel, Ya.M. Blanter, et al., Phys. Rev. B. **63**, 174424, **2001**
5. К.И. Кугель, А.Л. Рахманов, А.О. Сбойчаков и др., ЖЭТФ **125**, 648, **2004**
6. С.А. Гудин, М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд и др., ЖЭТФ **148** (5), 1005, **2015**
7. М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев и др., ЖЭТФ **143**, 948, **2013**

### **ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ГАЛОГЕНИДАХ АДАМАНТАНА ПОД ДАВЛЕНИЕМ**

Данилов И. В., Громницкая Е. Л., Циок О. Б., Бражкин В. В.  
*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН*  
*idanilov@hppi.troitsk.ru*

Адамантан  $C_{10}H_{16}$  при нормальных условиях является молекулярным кристаллом, в котором присутствует ориентационная разупорядоченность. При повышении давления или понижении



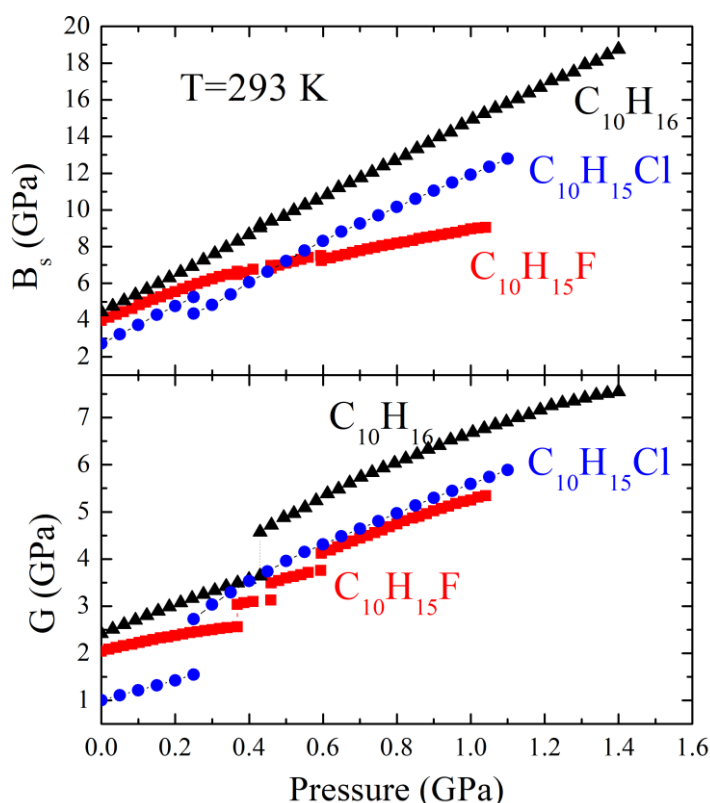


Рис. 1. Модули объемной упругости и сдвига адамантана, хлорадамантана и фторадамантана при комнатной температуре.

температуры эта разупорядоченная фаза переходит в упорядоченное состояние [1]. Такими же свойствами обладают и многие производные адамантана, в частности 1-хлорадамантан  $C_{10}H_{15}Cl$  и 1-фторадамантан  $C_{10}H_{15}F$  [2]. Мы исследовали скорости звука и упругие модули хлорадамантана и фторадамантана под давлением, как при комнатной температуре, так и при низких температурах. Детально изучили фазовые переходы из разупорядоченной фазы в упорядоченную под давлением и обратные переходы при снятии давления или отогреве из низких температур.

Из экспериментально полученных скоростей звука мы вычисляли упругие модули веществ – модуль сдвига и модуль объемной упругости. Оказалось, что модули адамантана выше модулей хлорадамантана и фторадамантана во всем диапазоне давлений (до 11 кбар) и во всем диапазоне температур (от 77 до 300 К). Фторадамантан имеет более высокие модули сдвига и объемной упругости, чем хлорадамантан, при температурах ниже комнатной, а также при комнатной температуре в ориентационно разупорядоченной фазе (рис. 1). Однако в ориентационно

упорядоченной фазе, полученной под давлением при комнатной температуре, модули хлорадамантана оказались выше, чем у фторадамантана. Также интересным является фазовый переход во фторадамантане. Если у адамантана и хлорадамантана переход четко выражен и заметен по скачку модуля сдвига, то во фторадамантане этот переход двухступенчатый. Есть предположения, что может существовать промежуточная фаза, которую находили при низких температурах 180 К [3], однако наши измерения скоростей звука при отогреве и проведенный дифференциальный термальный анализ не смогли подтвердить наличие этой фазы.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 19-12-00111).

#### Литература

1. T. Ito, Acta Cryst. **B29**, 364, **1973**
2. T. Clark, T. Mc. O. Knox, H. Mackle and M. A. McKervey, J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1, **73**, 1224-1231, **1977**
3. L. Yuan, S. Clevers, A. Burel, P. Négrier, M. D. Barrio, et al. Cryst. Growth and Design, Am. Chem. Soc., **17** (6), 3395-3401, **2017**

### **МАГНИТНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В МИКРОПРОВОДАХ $\alpha$ -Fe/PrDy-FeCo-B**

Дворецкая Е. В., Коплак О. В., Колмаков А.О.

*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

Перспективной областью применения двухфазных микропроводов с кристаллическим ядром  $\alpha$ -Fe и аморфной оболочкой PrDy-FeCo-B, демонстрирующих магнитную бистабильность, являются нано- и микроманипуляторы, а также датчики магнитного поля, механических напряжений и температуры [1-4].

Одиночный микропровод  $\alpha$ -Fe/PrDy-CoFe-B демонстрирует спин-переориентационный переход при температуре 245 К, обусловленный конкуренцией магнитной анизотропии в подрешетках редкоземельных (RE) и переходных (TM) металлов и сопровождаемый скачкообразным изменением магнитной восприимчивости, остаточной намагниченности и магнитной анизотропии (рис. 1а). Смещение критической температуры перехода  $T_{crit}$  от 245 К (0 Т) до 70 К (1 Т) наблюдается в микропроводах  $\alpha$ -Fe/PrDy-CoFe-B в увеличивающемся

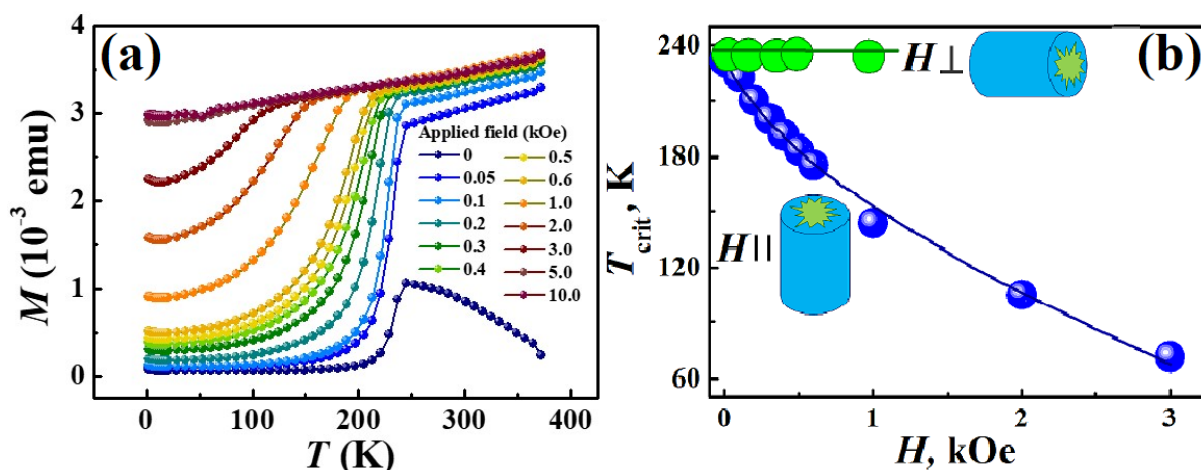


Рис.1. (а) Зависимость величины скачка намагниченности  $\Delta M$  от внешнего магнитного поля; (б) Зависимость критической температуры перехода  $T_{\text{crit}}$  от внешнего магнитного поля при нагреве образца от 2 К.

внешнем продольном магнитном поле (от 0 Т до 1 Т), при этом изменение намагниченности в перпендикулярном внешнем магнитном поле при критической температуре перехода практически отсутствует (рис. 1б).

При низких температурах (ниже  $T_{\text{crit}}$ ) наблюдается эффект обменного смещения, вызванный взаимодействием между оболочкой PrDy-CoFe-V и ферромагнитным ядром  $\alpha$ -Fe. Величина смещения гистерезиса и его знак зависят от напряженности магнитного поля и ориентации поля, применяемого при охлаждении микропровода. Зависимость смещения гистерезиса от температуры и магнитной истории указывает на обменную связь между ядром и оболочкой микропровода. Наличие зависимости критической температуры перехода от внешнего магнитного поля, подчиняющейся классической теории для перехода в сильно неупорядоченной аморфной системе с высокомагнитной анизотропией, свидетельствует о том, что в оболочке микропровода  $\alpha$ -Fe/PrDy-CoFe-V происходит магнитный фазовый переход, обусловленный переходом между высокотемпературным состоянием классического Гейзенберговского ферромагнетика в состояние низкотемпературного Изинговского спинового стекла.

Работа поддержана проектом РФФИ «Стабильность» 20-32-70025.

#### Литература

1. О.В. Коплак и др., *ФТТ*, **62** (4), 562, 2020
2. R.V. Morgunov и др., *ЖММ*, **497**, 166004, 2020
3. О.В. Коплак и др., *ФТТ*, **61**, 2090, 2019
4. О.В. Коплак и др., *ФТТ*, **8**, 1187, 2020

## УСТОЙЧИВОСТЬ СИЛИКАТОВ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ ВОДОРОДА И СОЗДАНИЕ ГИДРИДОВ НОВОГО ТИПА

Ефимченко В. С., Мелетов К. П., Федотов В. К., Барковский Н. В.,  
Прокошин А. В.

*Институт физики твердого тела РАН*  
*efimchen@issp.ac.ru*

Силикаты и водород являются важными составляющими различных геологических систем.

Ранее, было обнаружено частичное разложение форстерита ( $Mg_2SiO_4$ ) до  $MgO$ , силана и воды при давлениях водорода 2–10 ГПа и  $T > 700$  °С [1,2]. Вызванное водородом разложение фаялита ( $Fe_2SiO_4$ ) недавно наблюдалось при температурах, варьирующихся от  $\sim 375$  °С при  $P = 1.4$  ГПа до  $\sim 175$  °С при  $P = 7.5$  ГПа. Было показано, что фаялит полностью разлагается до смеси  $SiO_2$ ,  $H_2O(D_2O)$  и металлического Fe или  $FeH(D)$ , когда он контактирует с более чем 5 молями молекулярного водорода или дейтерия ( $H_2(D_2)/Fe_2SiO_4$ ). Варьируя количество дейтерия в ячейке, при давлении  $P=7.5$  ГПа и  $T=280$  °С, нами было обнаружено изменение состава твердых продуктов разложения фаялита от смеси ферросилита ( $FeSiO_3$ ) и железа при  $D_2/Fe_2SiO_4 = 1$  до смеси диоксида кремния и железа при  $D_2/Fe_2SiO_4 = 2.2$ .

В тоже время, аморфные силикаты магния и кварцевое стекло оказались устойчивы при данных условиях и растворяли в себе значительные количества водорода в молекулярной форме.

Растворы молекулярного водорода в аморфных силикатах магния и кварцевом стекле  $Mg_ySiO_{2+y}$  ( $y=0\div 0.88$ ) были синтезированы при давлении водорода 7.5 ГПа и  $T=250$  °С. Содержание водорода  $X$  закаленных образцов  $Mg_ySiO_{2+y}-XH_2$  нелинейно уменьшалось с увеличением концентрации  $y$  ионов магния с  $X = 0.600(3)$  при  $y = 0$  до  $X = 0.259(3)$  при  $y = 0.88$ . Было показано, что водород растворялся во всех образцах в виде молекул  $H_2$ , а ширина линии растягивающих колебаний  $H_2$  в рамановских спектрах сужалась примерно в четыре раза с увеличением концентрации магния.

Оба этих эффекта были вызваны уменьшающейся дисперсией в размерах силикатных полостей в аморфной матрице, которая изменяется от структуры кварцевого стекла при  $y \leq 0.32-0.49$  до структуры плотноупакованного энстатитового стекла при более высоких концентрациях магния.

Подробное исследование раствора  $\text{SiO}_2\text{-}0.6\text{H}_2$  методом рамановской спектроскопии (рисунок 1) также выявило существенное влияние растворившегося водорода на фононный спектр матрицы кварцевого стекла.

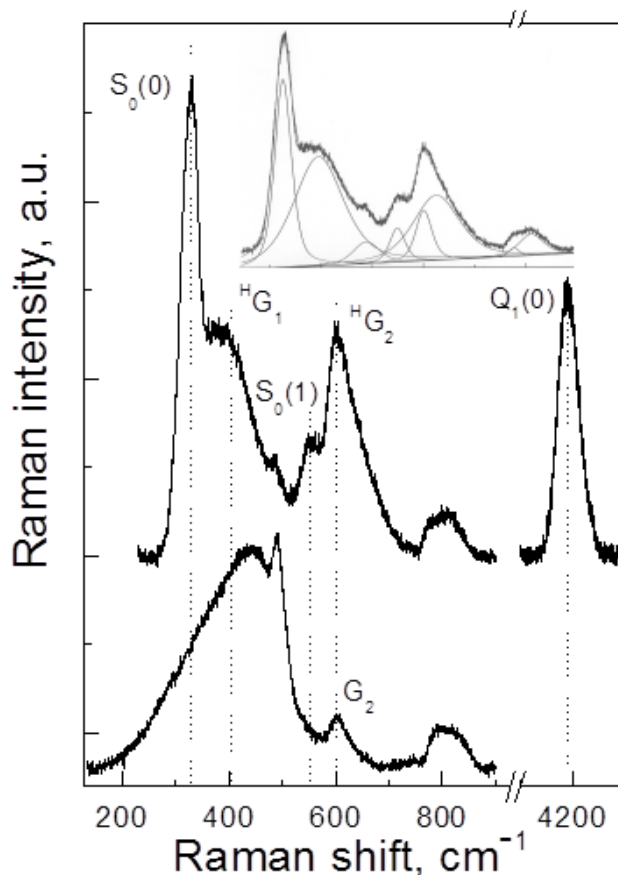


Рисунок 1. Спектры комбинационного рассеяния  $\text{SiO}_2\text{-}0.6\text{H}_2$  (верхний спектр) и чистого кварцевого стекла (нижний спектр). Вставка – аппроксимация отдельных фононных полос в спектре комбинационного рассеяния по функции Фойгта.  $S_0$  и  $Q_1$ - вращательные и вибрационная моды  $\text{H}_2$ .

Столь сильное взаимное изменение фононных спектров силикатной матрицы и водорода указывают на образование гидридов нового типа, относящихся к классу соединений включения.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 18-02-01175).

#### Литература

1. A. Shinozaki et al., Phys. Chem.Miner., **39**, 123, **2012**
2. A. Shinozaki et al., Americ. Min., **98**, 1604, **2013**

## **ОПЫТ ОРГАНИЗАЦИОННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СЕКТОРА ОЦЕНКИ И РАЗВИТИЯ ИОФ РАН ПО УЧЁТУ И ПОВЫШЕНИЮ КВАЛИФИКАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАУЧНЫХ РАБОТНИКОВ**

Захарова Е.В., Демишев С.В.

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

*elena.zakharova.office@gmail.com*

Одним из основных направлений деятельности сектора оценки и развития ИОФ РАН является работа по учёту квалификационных характеристик научных работников Института, а также методы повышения квалификационных характеристик, в частности публикационной активности. В этой своей деятельности сектор оценки и развития взаимодействует с Учёным советом, сектором Учёного секретаря, конкурсной комиссией, а также руководителями подразделений института.

В классической системе Российской академии наук замещение вакантных должностей происходило по конкурсу, который проводил Учёный совет института. В «новейшей истории» Учёный совет был исключён из этого процесса и решения по замещению вакантных должностей, а конкурсные процедуры находятся в компетенции специальной конкурсной комиссии, решения которой не подконтрольны Учёному совету. В ходе реформирования системы управления Институтом общей физики им. А. М. Прохорова РАН была решена задача возвращения Учёного совета на утраченное им центральное место в проведении кадровой политики. Для реализации этого Учёный совет института формирует из своего состава постоянно действующую кадровую комиссию, дающую рекомендации по занятию научными работниками должностей, в том числе должностей руководителей отделов, лабораторий и иных научных структурных подразделений. К компетенции кадровой комиссии относятся рассмотрение переходов научных работников из одного структурного подразделения в другое и выработка соответствующих рекомендаций, разработка и контроль исполнения кадровой политики института, составной частью которой являются привлечение к научной деятельности молодых учёных и специалистов, становление и сохранение научных школ.

Важным вопросом, определяющим порядок и содержание конкурса, являются минимальные квалификационные требования к занятию тех или иных должностей. Анализ нормативных документов показывает, что они не включают качественных или количественных критериев, отвечающим требованиям, сформулированным Минобрнауки. В связи с этим в ИОФ РАН были разработаны и утверждены минимальные квалификационные требования и характеристики соискателей, необходимые для занятия научных должностей и должностей руководителей отделов и лабораторий. Указанные требования, включающие минимальные показатели деятельности и рекомендуемые требования к квалификации, являются обязательными при проведении аттестаций и конкурсов на замещение вакантных должностей. Структурой, обеспечивающей проверку соответствия соискателя вакантной должности квалификационным требованиям, является сектор оценки и развития, который формирует пакет документов, содержащий, в частности, справку сектора оценки и развития о наукометрических показателях соискателя и его соответствии квалификационным характеристикам, для рассмотрения кандидатуры на заседании конкурсной комиссии.

Сектором оценки и развития разработана база данных, одной из функций которой является учёт квалификационных характеристик научных работников. Это позволяет также составлять рекомендации по повышению публикационной активности научных работников, которая учитывается не только при прохождении конкурса на вакантную должность, но и в различной отчётности института.

В докладе рассматривается практическое взаимодействие научное подразделение – сектор оценки и развития – кадровая комиссия Учёного совета – конкурсная комиссия института при проведении конкурсных процедур и особенности взаимодействия с внешними информационными системами. Приводится схема рассмотрения кандидатур и проведения конкурсных процедур в дистанционном режиме без проведения очных заседаний. Обсуждаются возможности выработки методов повышения публикационной активности при анализе квалификационных показателей научных работников.

# СТРУКТУРА НОВОЙ МОДИФИКАЦИИ D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Зибров И. П., Филоненко В. П.

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

Поведение оксидов редкоземельных элементов под давлением изучалось всего в нескольких работах, а под давлением и при температуре-всего в одной [1]. В этой систематической работе Ноекстра Н. Р. показал, что давление и температура стабилизируют В-модификацию, причем уже при  $P > 4.0$  ГПа оксиды от Dy до Lu кристаллизуются в этой плотной моноклинной ячейке. Ранее мы обнаружили, что при термобарической обработке исходного кубического C-RE<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (RE=Lu, Yb) при  $P=5$  ГПа и  $T=1000$  С образуется не только В-модификация этих оксидов, но и неизвестная ранее тетрагональная модификация. Целью данной работы была расшифровка структуры этой модификации на примере Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Методика термобарической обработки материала в камерах «тороид» подробно описана в [2]. Извлеченные из камеры высокого давления образцы очищали механически от защитной фольги и подвергали рентгенофазовому анализу в Гинье-камере G670 (Huber, Германия)

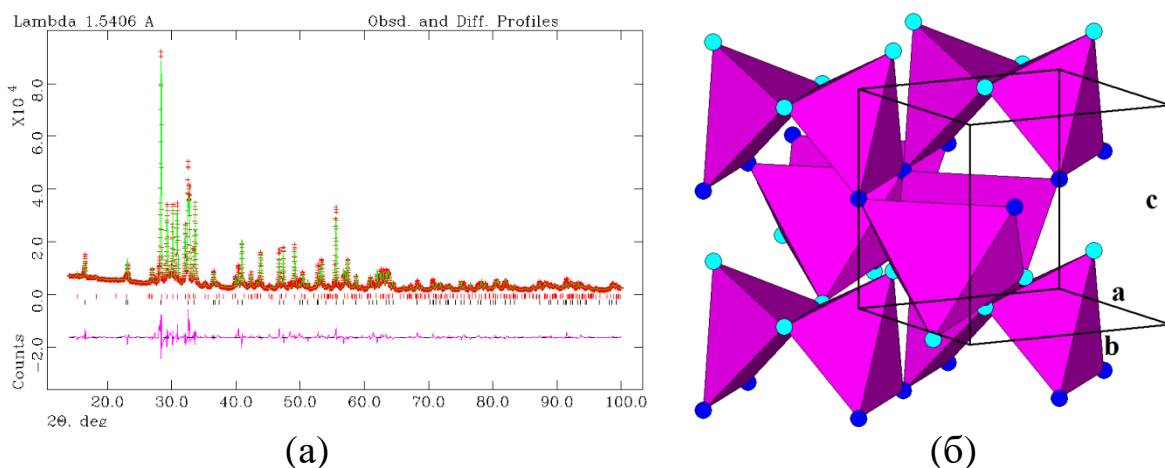


Рис. 1. Полнопрофильный анализ D- и В-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и структура D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. а - экспериментальные (+), рассчитанные (сплошная линия) и разница между экспериментальными и рассчитанными данными (нижняя кривая) рентгеновской дифракции. Позиции всех разрешенных брэгговских рефлексов показаны в виде рядов вертикальных маркеров: верхний ряд – В-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, нижний ряд – D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; б – структура D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, состоящая из пирамид [YbO<sub>5</sub>], соединенных ребрами попарно. Сферы в вершинах пирамид – атомы кислорода.



(Cu  $K_{\alpha 1}$  излучение). Анализ дифрактограмм показал, что образцы двухфазные и состоят из В-фазы и новой тетрагональной модификации, названной нами D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Рис.1). При расшифровке структуры использовали метод проб и ошибок, т.к. присутствие В-модификации не позволяло использовать прямые методы. Различные модели проверяли с использованием полнопрофильного анализа (пакет программ GSAS [3]). Результаты уточнения корректной модели структуры D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub> представлены на Рис. 1а и в Таблице 1. Атомные координаты и изотропные тепловые параметры для D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub> представлены в Таблице 2.

На Рис. 1б показана структура D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Координационным полиэдром иттербия является четырехугольная пирамида из атомов кислорода (к.ч. 5). Пирамиды связаны попарно общими ребрами основания. Эти пары связаны между собой вершинами. Пятерная координация в оксидах редких земель встречается впервые-обычными координационными числами являются 6, 7, 8. Это довольно необычный результат, но, плотность D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Таблица 1) ниже, чем плотность исходной С-фазы (9.21 г/см<sup>3</sup>) и, тем более, В-модификации (10.058 г/см<sup>3</sup>), что может быть объяснено высокой сжимаемостью D-фазы, т.е. ее плотность под давлением выше, чем у С-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Исследование выполнено при частичной поддержке грантов РФФИ №19-02-00162 и №17-02-01285.

Таблица 1.  
Экспериментальные  
данные для D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

П.Г.	<i>P-4 2<sub>1</sub> m</i>
a (Å)	5.49191(5)
c (Å)	5.34875(6)
V (Å <sup>3</sup> )	161.324(2)
Z	2
<i>d</i> -выч. (г/см <sup>3</sup> )	8.162
Весовая доля, %	38.21(6)
R <sub>F</sub>	0.0756
R <sub>P</sub>	0.0677
R <sub>WP</sub>	0.0956

Таблица 2. Атомные координаты, изотропные тепловые параметры  $U_{iso}$  (Å<sup>2</sup>) и занятости позиций для D-Yb<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Atom	Site	OCC	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{iso}$
Yb	(4e)	1.0	0.2178(1)	0.7178(1)	0.7003(2)	0.0127(3)
O1	(4e)	1.0	0.298(1)	0.798(1)	0.072(1)	0.056(3)
O2	(2b)	1.0	0	0	0.5	0.056(3)

#### Литература

1. Hoekstra H. R. J. of Inorg. Chem. **5**, 754-757, **1966**
2. Filonenko V.P., Zibrov I.P. Inorganic Materials, **37**, 9, 953, **2001**
3. Larson A.C., Von Dreele R.B., LANL, Rep. LA-UR-86-748, **1987**

## ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ МЕДИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ТРОЙНЫХ РАСПЛАВОВ Al-Cu С Fe, Co И Ni

Камаева Л. В.<sup>1,2</sup>, Стерхова И. 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 проведен сравнительный анализ концентрационных зависимостей структурных параметров, вязкости и кристаллизующей способности жидких сплавов Al-Cu-Fe, Al-Cu-Co и Al-Cu-Ni. Области концентраций выбирали в соответствии со стехиометрией квазикристаллических фаз в системах Al-Cu-Fe и Al-Cu-Co. Исследования в расплавах Al-Cu-Fe проводились при 12,5 ат.% Fe от 15 до 35 ат.% Cu, в Al-Cu-Co, при 15 ат.% Co, от 10 до 30 ат.% Cu и для Al-Cu-Ni при 10 ат.% Ni от 17 до 40 ат.% Cu.

Функции радиального распределения атомов (rdf) расплавов Al-Cu-Fe, Al-Cu-Co и Al-Cu-Ni из различных областей концентраций определяли методом *ab initio* молекулярной динамики и сравнивали с данными рентгеновской дифракции этих расплавов. Анализ концентрационных изменений rdf, а также основных характеристик структуры позволил определить индивидуальные особенности межатомного взаимодействия в расплавах и их концентрационные изменения.

Вязкость и переохлаждение расплавов Al-Cu-Fe, Al-Cu-Co и Al-Cu-Ni определяли методами вискозиметрии и дифференциального термического анализа. Анализ концентрационных зависимостей вязкости показывает, что все системы характеризуются немонотонным поведением вязкости вдоль изученных концентрационных сечений. Изотермы имеют максимумы и минимумы. Наиболее выражены немонотонности в системе Al-Cu-Ni менее выражены в Al-Cu-Fe. Показано, что изотермы вязкости хорошо согласуются с концентрационными изменениями химического параметра ближнего порядка, который описывает эффективное парное межатомное взаимодействие в жидких сплавах.

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

# АНИЗОТРОПИЯ ПРОВОДИМОСТИ НАД КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРОЙ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ НЕОДНОРОДНЫХ 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.  
kesharpu.kaushal@gmail.com*

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**

## МЕХАНИЗМЫ НУКЛЕАЦИИ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ

Кирова Е. М., Писарев В. В.

*Национальный исследовательский университет*

*«Высшая школа экономики»*

*kirova@phystech.edu*

Мы представляем молекулярно-динамическое (МД) исследование размерного эффекта на процесс формирования и роста кристаллических ядер в переохлажденной пленке тантала [1] и молибдена. Процесс рассмотрен на множестве траекторий МД, которые получаются сверхбыстрым охлаждением из стабильной жидкой фазы до температуры ниже температуры стеклования. Мы описываем процесс нуклеации двумя морфологическими параметрами. Наряду с размером ядра, мы анализируем асферичность, которая является мерой отклонения кристаллических ядер от идеализированной сферической формы. Этот метод позволяет продемонстрировать, что существует два пути эволюции формы и размера кристаллического ядра. Первый путь - рост кристаллов через высокие значения асферичности. Показано, что это вызвано слиянием кристаллов (коалесценцией). Этот механизм не зависит от размера системы. Второй путь - формирование долгоживущих кристаллических кластеров, которые не приводят к кристаллизации всей системы на временной шкале моделирования. Мы показываем, что такие кластеры имеют общие геометрические особенности, которые сильно зависят от размера системы.

Исследование проводилось в рамках Программы фундаментальных исследований Университета НИУ ВШЭ «5-100».

### Литература

1. E. M. Kirova, V. V. Pisarev, J. Cryst. Growth, **528**, 125266, **2019**

# МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА КОЛОННЫЙ ГРАФЕН: ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ КОНФИГУРАЦИИ

Колесникова А. С., Мазепа М. М.

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»*

Механические свойства являются одними из наиболее важных свойств, которыми должен обладать материал при использовании его в наноустройствах в качестве элементарной базы. Более детальное изучение механических свойств колонного графена необходимо для расширения областей применения этого композита, несмотря на активное изучение его механических свойств [1-5].

Целью данной работы является теоретическое исследование модуля Юнга колонного графена в зависимости от его геометрических параметров: длины, диаметра и хиральности углеродной нанотрубки (УНТ), размера листа графена. Деформация композита была проведена на 3%.

При исследовании модуля Юнга протяженного колонного графена, содержащего armchair нанотрубки было установлено, что [6]:

- модуль Юнга композита увеличивается, когда при растяжении вдоль нормали к графеновому листу и с увеличением длины УНТ;
- модуль Юнга композита уменьшается, когда при растяжении вдоль направлений графенового листа и с увеличением длины УНТ композита.

Выявлено, что предел прочности при растяжении композита колонный графен в направлении графенового листа (модуль Юнга 630 ГПа) превышает предел прочности при растяжении в направлении, перпендикулярном графеновому листу (модуль Юнга 150 ГПа).

При исследовании модуля Юнга конечномерного колонного графена, содержащего zigzag нанотрубки, было установлено, что [7]:

- модуль Юнга во всех композитах увеличивается с увеличением длины УНТ;
- модуль Юнга увеличивается с увеличением размера графенового листа в композите.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Президентской стипендии СП-310.2019.1.

## Литература

1. M. Moradi, AIP Advanced, **5**, 117143, **2015**
2. K. Duan, L. Li, Y. Li, Y. Hu. Materials and Design, **147**, 11, **2018**
3. C.H. Wang, T.H. Fang, W.L. Sun, J. Phys. D: Appl. Phys., **47**, 405, **2014**
4. T.-H. Fang, W. J. Chang, Y. C. Fan, W. L. Sun, Japanese Journal of Applied Physics, **55**, 040301, **2016**
5. S. Sangwook et. al., Carbon, 50, 603, **2012**
6. A.S. Kolesnikova, M.M. Mazepa, Physics of the Solid State. 60, 1827, **2018**
7. A.S. Kolesnikova, M.M. Mazepa, I.V. Kirillova, L.Y. Kossovich, Reporters, Markers, Dyes, Nanoparticles, and Molecular Probes for Biomedical Applications XI, **10893**, 10893, **2019**

## ОСОБЕННОСТИ АНОМАЛЬНОГО ЭФФЕКТА ДЖОЗЕФСОНА В ИСКРИВЛЕННЫХ МАЙОРАНОВСКИХ НАНОПРОВОДАХ

Копасов А. А.<sup>1</sup>, Кутлин А. Г.<sup>2</sup>, Мельников А. С.<sup>1,3</sup>

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

<sup>2</sup>*Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems,  
D-01187 Dresden, Germany*

<sup>3</sup>*Научно-технологический университет «Сириус»,  
Олимпийский пр., д. 1, Сочи, 354340*

Полупроводниковые нанопровода с наведенной сверхпроводимостью являются перспективной платформой для поиска майорановских состояний и реализации квантовых вычислений на их основе [1]. Существующие экспериментальные свидетельства реализации майорановских мод в InAs/Al системах, основанные на анализе транспортных измерений, не могут быть однозначно интерпретированы в пользу топологической сверхпроводимости. В связи с этим, необходимы альтернативные тесты для доказательства реализации топологически нетривиальной фазы. Одним из таких тестов может быть измерение зависимости критического тока  $I_c$  от магнитного поля  $H$  в джозефсоновских контактах, состоящих из майорановских нанопроводов. В работе [2] было показано, что при топологическом переходе зависимость  $\partial I_c / \partial H$  должна испытывать скачок.

Важно также отметить, что для реализации существующих протоколов брэйдинга требуется изготовление сложных сетей нанопроводов [2]. В связи с этим, значительный интерес вызывают эффекты, связанные с влиянием геометрии. В недавних работах было

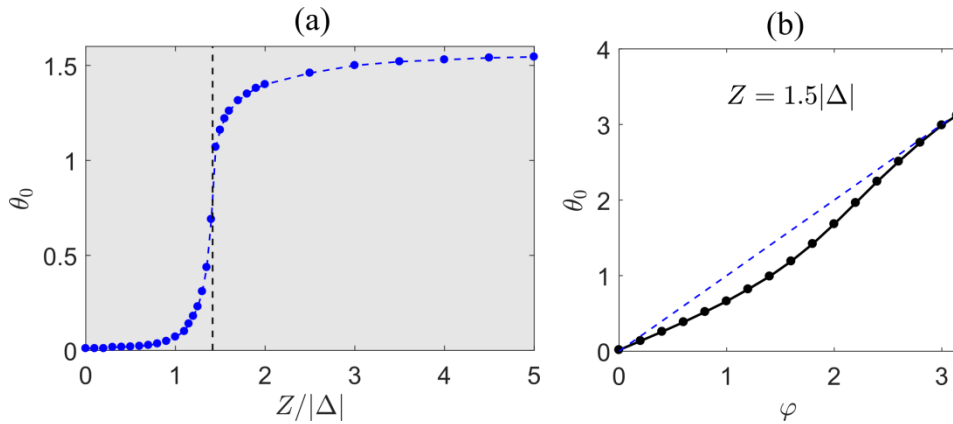


Рис. 1 (а) Фазовый сдвиг в ток-фазовом соотношении в зависимости от зеемановского расщепления  $Z$  при угле разориентации  $\varphi = \pi/2$ . Штрихованная линия показывает значение  $Z$ , при котором происходит топологический переход. (б) Фазовый сдвиг  $\theta_0$  в зависимости от  $\varphi$  при  $Z = 1.5|\Delta|$ .

показано, что в джозефсоновских контактах, состоящих из майорановских нанопроводов в топологически нетривиальной фазе с конечным углом разориентации, влияние геометрии состоит в появлении дополнительного фазового сдвига в ток-фазовом соотношении (так называемый аномальный эффект Джозефсона), определяемого углом разориентации [3].

Целью данной работы является исследование аномального эффекта Джозефсона в контактах между майорановскими нанопроводами, имеющими конечный угол разориентации  $\varphi$ . На основе численного анализа уравнений Боголюбова – де Жена продемонстрирован кроссовер между стандартным и аномальным эффектом Джозефсона при увеличении внешнего магнитного поля, направленного перпендикулярно подложке (Рис.1). В работе показано, что появление такого кроссовера вызвано доминирующим вкладом надщелевых состояний в сверхток вблизи топологического фазового перехода в то время, как вклад в сверхток от подщелевых состояний отличен от нуля только в узком диапазоне сверхпроводящей разности фаз. В работе также обсуждается возможность экспериментального наблюдения данного явления в текущем поколении майорановских нанопроводов, основанном на InAs/Al системах.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 19-31-51019. Численные расчеты спектров квазичастиц в джозефсоновских контактах между майорановскими нанопроводами выполнены при поддержке гранта РНФ № 20-12-00053.

## Литература

1. R. M. Lutchyn, J. D. Sau, S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett., **105**, 077001, **2010**; Y. Oreg, G. Refael, F. von Oppen, Phys. Rev. Lett., **105**, 177002, **2010**
2. P. San-Jose, J. Cayao, E. Prada and R. Aguado, New J. Phys., **15**, 075019, **2013**
3. D. Aasen, M. Hell, R. V. Mishmash et al., Phys. Rev. X, **6**, 031016, **2016**
4. C. Spånslätt, Phys. Rev. B, **98**, 054508, **2018**; A. G. Kutlin, and A. S. Mel'nikov, Phys. Rev. B, **101**, 045418, **2020**

## ЛАЗЕРНАЯ И МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДУЛЯЦИЯ ОБМЕННОГО СМЕЩЕНИЯ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ РАССЕЙЯНИЯ В МИКРОПРОВОДАХ НА ОСНОВЕ 3D И 4F МЕТАЛЛОВ

Коплак О. В.<sup>1</sup>, Дворецкая Е. В.<sup>1</sup>, Шашков И. В.<sup>2</sup>,  
Сидоров В. Л.<sup>1</sup>, Моргунов Р. Б.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

<sup>2</sup>*Институт физики твердого тела Российской академии наук  
o.koplak@gmail.com*

Инженерия магнитомодулированных ферромагнитных микропроводов в редкоземельной аморфной оболочке PrDy-FeCoV, полученных методом экстракции висящей капли расплава, открывает широки возможности создания новых функциональных магнитных и магнито-импедансных свойств [1-3]. Анализ динамики доменных стенок и процессов перемагничивания  $\alpha$ -Fe/PrDy-FeCoV микропроводов (рис. 1a) проведен с использованием техники магнитооптических индикаторных пленок (MOIF), основанном на магнитооптическом эффекте Фарадея в оптически прозрачной гранатовой пленке, магнитная структура которой чувствительна к магнитному полю (рис. 1b). Результирующий сигнал прямо пропорционален поперечной составляющей  $M_{\perp}$  намагниченности микропровода [4] (рис. 1b).

В продольном магнитном поле  $\alpha$ -Fe/PrDy-FeCoV микропровод, диаметром 30 нм, демонстрирует многодоменную структуру (рис. 1b). В отсутствие магнитного поля магнитные неоднородности исчезают, а увеличение магнитного поля приводит к увеличению числа черных и белых пятен на MOIF контрасте, но не меняет их положения. Гармоники на быстром преобразовании Фурье (FFT) профиля MOIF (рис. 1c), отсканированного вдоль оси микропровода (рис. 1b), соответствуют сумме синусоидальной модуляции



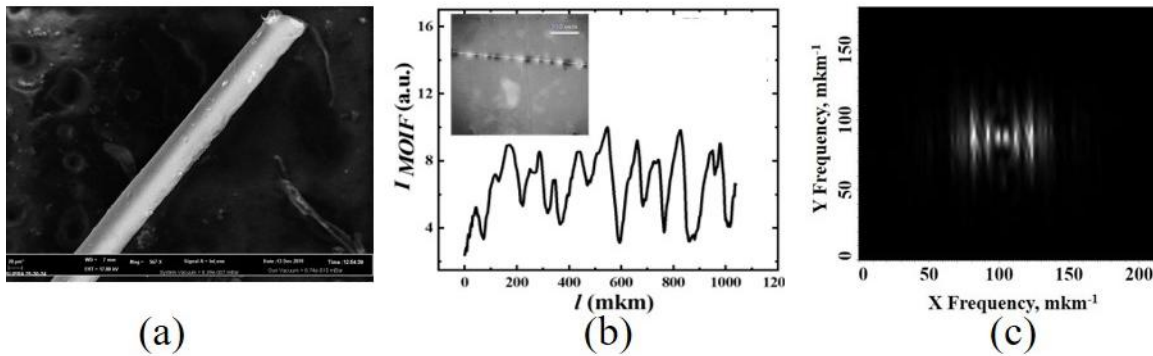


Рис.1. (a) СЭМ-изображение  $\alpha$ -Fe/PrDy-FeCoB микропровода, (b) Распределения МОИФ-сигнала в микропроводе в продольном магнитном поле  $H = 300$  Ое. На вставке: изображение МОИФ и соответствующий профиль сканирования. (c) FFT-изображение МОИФ

намагниченности с пространственными периодами 125 мкм, 115 мкм и 100 мкм. В поперечном магнитном поле многодоменной структуры не наблюдалось, намагниченность микропровода соответствовала поведению одного домена. Обсуждается вклад неоднородностей и кристаллических микровключений в процессы перемагничивания. Проведено локальное элементное картографирование микропровода с помощью энергодисперсионного микроанализа, оценена однородность механических и пластических свойств оболочки микропровода. Создана магнитомодулированная структура и периодический рельеф на поверхности микропроводов с помощью лазерной гравировки, со схожими пространственными периодами. С помощью механической модуляции алмазным индентором на поверхности микропроводов созданы микроячейки и сформирована периодическая деформация вдоль длины микропровода. Проведено сравнения процессов перемагничивания микропроводов  $\alpha$ -Fe/PrDy-FeCoB, вызванных разными источниками периодических возмущений их структуры с помощью магнито-оптической микроскопии и МОИФ. Оценен вклад конкуренции поля размагничивания и внутрикристаллической анизотропией в процессы перемагничивания микропроводов и их отклик на лазерную и механическую модуляцию. Получены оценки обменного и магнитного дипольного взаимодействия между ферромагнитным ядром  $\alpha$ -Fe и ферримагнитной оболочкой PrDy-FeCoB микропровода после лазерной и механической модуляции.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ «Стабильность» 20-32-70025 и выполнена в соответствии с гос.заданием ИПХФ РАН № АААА-А19-119092390079-8.

## Литература

1. R. Morgunov; O. Koplak *Materials Letters*, **273**, 127954, **2020**.
2. О.В. Коплак и др., *ФТТ.*, **62**, 1187- 1191, **2020**.
3. R.B. Morgunov и др., *ЖМММ.*, **497**, 166004, **2020**
4. V. I. Nikitenko, et al., *JAP.*, **79**, 6073, **1996**.

## Е-Т ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА КЕРАМИК PMN-PT

Королева Е. Ю.<sup>1</sup>, Гасяк Т.К.<sup>2</sup>, Вахрушев С.Б.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*ФТИ им. А.Ф.Иоффе, г. Санкт-Петербург*

<sup>2</sup>*СПбПУ Петра Великого, г. Санкт-Петербург*

*e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru*

Сегнетоэлектрики релаксоры представляют интерес, как с практической, так и с фундаментальной точки зрения. Монокристаллы релаксоров обладают высокими значениями диэлектрической проницаемости (десятки тысяч), пьезо- и электрострикционных коэффициентов в широком температурном диапазоне, что делает их крайне привлекательными материалами для применения в суперконденсаторах, сегнетоэлектрической памяти и различных пьезодатчиках и приводах. Особый интерес для практических применений представляют керамические материалы, и они активно исследуются в последние десятилетия во всем мире. Несмотря на большой интерес к данным материалам и большое число исследований, остаются открытые вопросы о природе низкотемпературного стеклоподобного состояния. Одна из наиболее важных особенностей, отличающих релаксоры от дипольных стекол - это существование индуцированного электрическим полем фазового перехода в упорядоченную сегнетоэлектрическую фазу, стабильную в определенном интервале температур. Так, переход в сегнетоэлектрическую фазу в модельном релаксоре магнониобате свинца (PMN) может быть достигнут только в полях выше некоторого порогового значения и в определенных кристаллографических направлениях [1, 2]. Однако в керамике PMN не удавалось индуцировать сегнетоэлектрическую фазу даже в больших электрических полях.

Данная работа посвящена исследованию диэлектрических свойств керамик чистого PMN и твердых растворов магнониобата – титаната свинца PMN-PT с содержанием титаната свинца 10 и 20%,

выращенных в Университете г. Сиань, Китай в широком температурном и частотном диапазонах в различных смещающих электрических полях. Измерения проводились на ультраширокополосном диэлектрическом спектрометре с криосистемой Novocontrol BDS80 (Германия). Для проведения электрических измерений на образцы были напылены золотые электроды с подслоем хрома для лучшей адгезии.

На рис. представлена температурная зависимость мнимой части диэлектрической проницаемости керамики чистого PMN на частоте 1 Гц, полученная при охлаждении во внешнем поле 5 кВ/см (field cooling, FC), и последующий отогрев без поля (zero field heating, ZFH). При охлаждении в поле на зависимости  $\epsilon''(T)$  появляется дополнительная особенность при температуре около 220 К, соответствующая фазовому переходу в сегнетоэлектрическое состояние. При последующем отогреве без поля наблюдается резкий пик при температуре  $\sim 190\text{К}$  при переходе из сегнетоэлектрического состояния в стеклоподобное. Подобные аномалии хорошо изучены в монокристаллах PMN [2] и PMN-PT, однако в керамике PMN ранее не наблюдались.

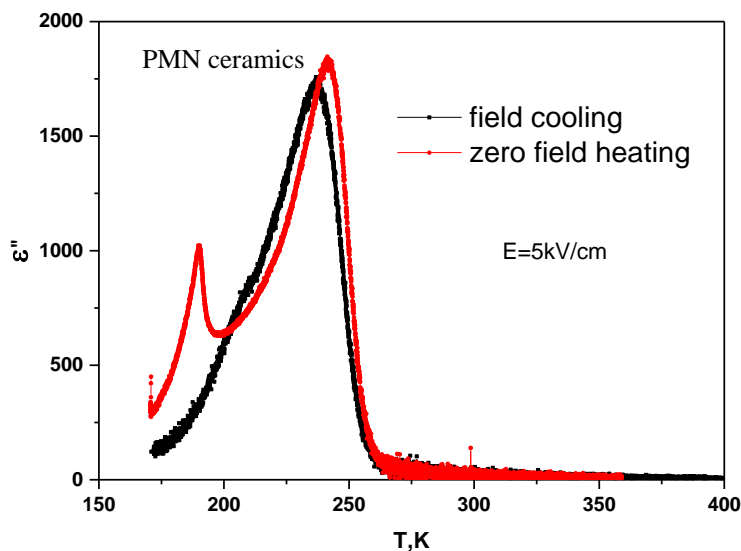


Рис. Температурная зависимость мнимой части диэлектрической проницаемости керамики чистого PMN на частоте 1 Гц. FC режим - черная кривая, ZFH - красная кривая.

Также нами построены E-T фазовые диаграммы керамик твердых растворов PMN-PT и исследовано поведение нелинейного отклика, которое позволяет более точно определить температуры фазовых переходов.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 19-52-53026 ГФЕН\_а «Морфотропная фазовая граница на фазовой диаграмме температура – электрическое поле в пьезоэлектриках релаксорах»).

## Литература

1. R. Sommer, N.K. Yushin, J. J. Van der Klink. *Physical Review B*, **48**, 13230, **1993**
2. Е.В. Колла, С.Б. Вахрушев, Е.Ю. Королева, Н.М. Окунева. *Физика твердого тела*, **38**, 2183, **1996**

## ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИЙ И ПЛАВЛЕНИЕ В ДВУМЕРНЫХ КОЛЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Корсакова С. А., Яковлев Е. В., Юрченко С. О.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия*  
*sofia.korsakova@gmail.com*

Коллоидные суспензии с управляемым межчастичным взаимодействием представляют большой интерес для современной физики как с точки зрения фундаментальных, так и практических применений [1]. Наибольший интерес представляет самосборка коллоидных суспензий во внешнем вращающемся электрическом поле, которое позволяет индуцировать между частицами дальнедействующее изотропное притяжение [2].

Коллоидные системы широко используются в качестве модельных систем и позволяют на уровне отдельных частиц изучать такие фундаментальные физические явления, коллективную динамику, плавление и кристаллизацию, доменную динамику, динамику дефектов, дислокаций и т.д [3].

В настоящей работе исследовалась динамика дислокаций в двумерных коллоидных кристаллитах (Рис. 1), с регулируемой магнитудой межчастичного взаимодействия при помощи внешнего вращающегося электрического поля. Изучено, как в процессе плавления кристаллитов меняется количество дефектов в структуре; в каких случаях механизм плавления переключается с поверхностного на объемный; областях кристаллитов различного размера происходит наиболее интенсивное появление новых дислокаций; выявлена новая закономерность, описывающая движение дислокаций. Также для коллоидных кристаллитов различного размера был исследован процесс плавления и установлено влияние размерного эффекта на характер и скорость плавления.

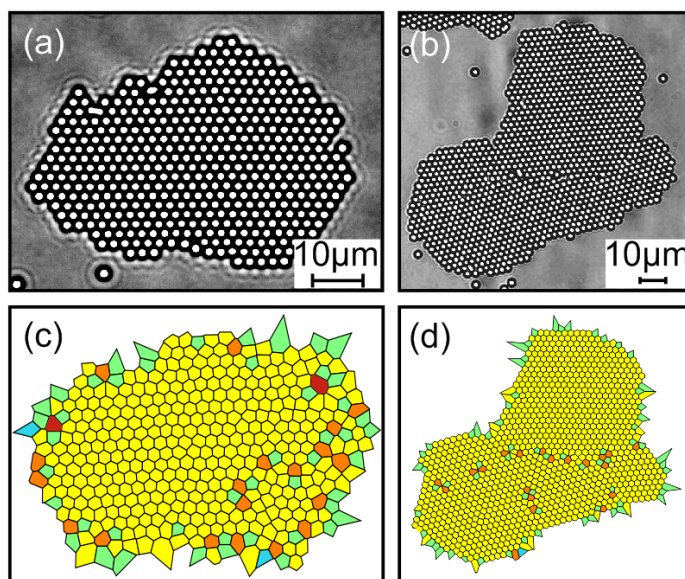


Рис.1 (a),(b) – Фото коллоидных кристаллитов разного размера, собранных во вращающихся электрических полях; (c) и (d) – результаты разбиения на ячейки Вороного, цвет соответствует количеству вершин

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ № 17-19-01691 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н. Э. Баумана

#### Литература

1. E.V. Yakovlev et. al. Sci Rep., **7**,1, 13727, **2017**
2. P.V. Ovcharov et. al., J. Phys. Chem. C, **121**, 48,26860, **2017**
3. E. Janai, et. al., J. Phys. Chem. C, p. **120**,15, 8392, **2016**

## МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ И АНИЗОТРОПИЯ РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ В $\text{ErB}_{12}$

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>, Гаврилкин С. Ю.<sup>3</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

<sup>3</sup>Физический институт имени П.Н.Лебедева РАН

krasikokirill@yandex.ru

Магнетики с фрустрированным основным магнитным состоянием привлекают существенное внимание в силу набора аномальных свойств, потенциально применимых на практике. Среди них  $\text{ErB}_{12}$

представляет особый интерес, так как, обладая сравнительно простой ГЦК решеткой, демонстрирует сложную несоразмерную магнитную структуру с антиферромагнитным упорядочением при  $T < T_N = 6.7\text{K}$  [1]. Недавно было обнаружено формирование динамических зарядовых страйпов вдоль направления  $[110]$  в  $\text{LuV}_{12}$  [2], возникающих в результате динамического кооперативного эффекта Яна-Теллера на кластерах  $\text{V}_{12}$ . Подобная электронная неустойчивость должна присутствовать и в  $\text{ErV}_{12}$ , так как она присуща именно борной подрешетке. В связи с этим, отдельный интерес представляет изучение магнитных фазовых диаграмм такой системы, так как магнитное упорядочение в  $\text{ErV}_{12}$  происходит за счет непрямого РККИ обмена через электроны проводимости, которые, в свою очередь, оказываются вовлечены в динамические зарядовые страйпы.

В работе представлены результаты измерения удельного сопротивления, намагниченности и теплоемкости  $\text{ErV}_{12}$  в диапазоне температур 1.7-10К, в магнитном поле до 80кЭ, направленном вдоль основных осей в ГЦК кристалле ( $\mathbf{H} \parallel [001]$ ,  $\mathbf{H} \parallel [110]$  и  $\mathbf{H} \parallel [111]$ ), 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.

По характерным особенностям на производных  $d\rho/dH$  были восстановлены магнитные фазовые диаграммы  $\text{ErV}_{12}$  (рис. 1). Для уточнения вида фазовой диаграммы при вращении внешнего магнитного поля от одного направления к другому в плоскости

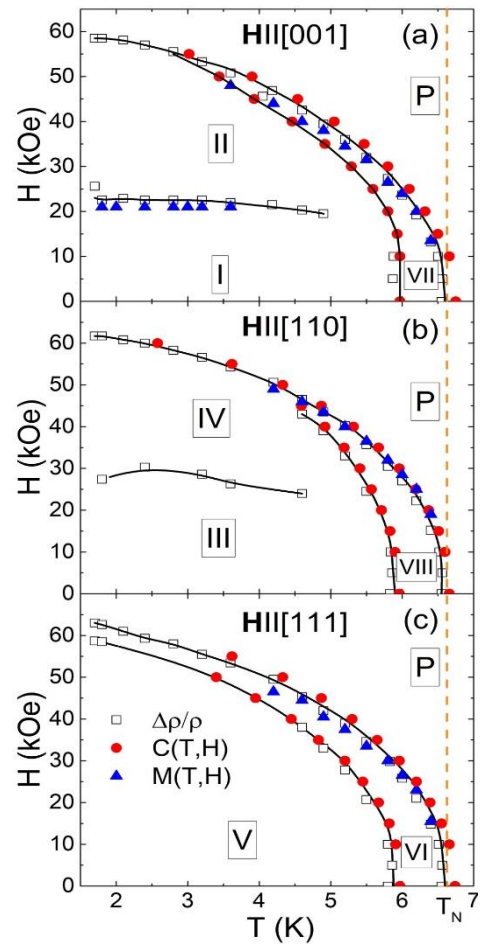


Рис. 1. Магнитные H-T фазовые диаграммы  $\text{ErV}_{12}$  для трех основных направлений поля в ГЦК решетке.

$\mathbf{H} \parallel (110)$  также были выполнены угловые и полевые измерения магнетосопротивления при температурах  $T=2\text{K}$  и  $T=5.5\text{K}$ .

Обнаруженная анизотропия, нетипичная для ГЦК кристалла, преимущественно связывается с перераспределением электронов проводимости, которые переходят в динамические зарядовые страйпы и не участвуют в РККИ осцилляциях спиновой плотности. В результате вдоль направлений, параллельных ( $\mathbf{H} \parallel [110]$ ) и перпендикулярных ( $\mathbf{H} \parallel [001]$ ) зарядовым страйпам наблюдаются области с подавлением непрямого обмена между магнитными моментами ионов  $\text{Er}^{3+}$ . Столь существенная перенормировка антиферромагнитного взаимодействия приводит к сложной магнитной фазовой диаграмме с большим количеством различных магнитных фаз и фазовых переходов.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (проект №18-02-01152).

#### Литература

1. K. Siemensemeyer, K. Flachbart, S. Gabani, S. Mat'as, Y. Paderno, and N. Shitsevalova, *J Solid State Chem* **179**, 2748, **2006**
2. N. B. Bolotina, A. P. Dudka, O. N. Khrykina, V. N. Krasnorussky, N. Y. Shitsevalova, V. B. Filipov, and N. E. Sluchanko, *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 265402, **2018**

### АНОМАЛЬНЫЙ МАГНЕТИЗМ В $\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{V}_6$

Краснорусский В. Н.<sup>1</sup>, Богач А. В.<sup>1</sup>, Кузнецов А. В.<sup>2</sup>,  
Шицевалова Н. Ю.<sup>3</sup>, Глушков В. В.<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>*Московский инженерно-физический институт, Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАНУ,  
Киев, Украина*

*krasnorussky@mail.ru*

Вопрос о природе эффекта колоссального магнетосопротивления в полуметалле с кубической структурой  $\text{EuV}_6$  остается открытым до настоящего времени [1-3]. Этот эффект принято связывать с формированием спиновых поляронов, появляющихся в широкой окрестности перехода из полупроводникового в металлическое состояние ниже точки ферромагнитного (ФМ) упорядочения  $T_C = 13,7\text{K}$ .



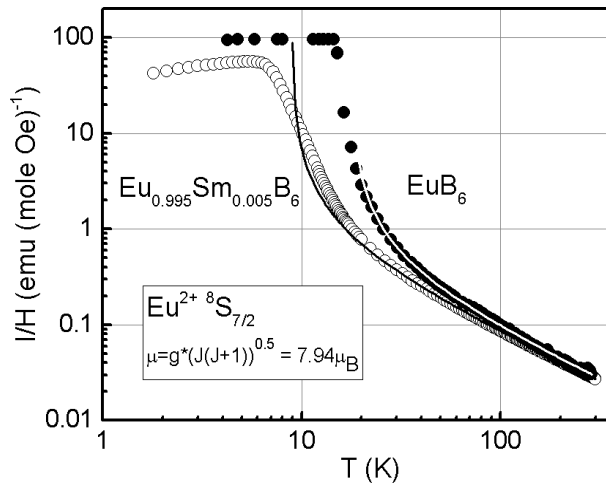


Рис. 1. Магнитная восприимчивость  $\chi(T)$  для  $\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{B}_6$  (○) и  $\text{EuB}_6$  (●) [3]. Линиями показаны результаты аппроксимации модифицированным законом Кюри-Вейсса.

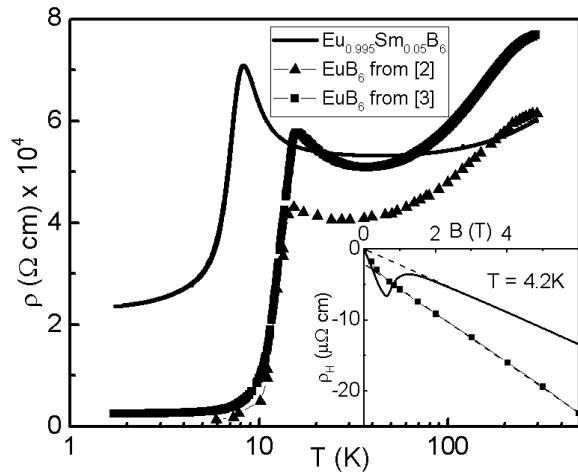


Рис. 2. Удельное сопротивление  $\rho(T)$   $\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{B}_6$  (линия) и  $\text{EuB}_6$  [2,3] (символы). На вставке представлено холловское сопротивление  $\rho_H(H)$  при  $T = 4.2$  К для  $\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{B}_6$  (линия) и  $\text{EuB}_6$  (символы). Пунктирные линии отображают нормальный вклад  $R_N$ .

В работе исследованы магнитные и транспортные свойства твердого раствора замещения  $\text{EuB}_6$  с 0,5% Sm в диапазоне температур 2 – 300 К в магнитных полях до 8 Тл. По данным магнитных измерений (рис. 1) замещение европия самарием приводит к уменьшению температуры Кюри от  $T_C \approx 17,8$  К ( $\text{EuB}_6$ ) до  $T_C \approx 8,9$  К ( $\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{B}_6$ ) при практически неизменном эффективном магнитном моменте ионов  $\text{Eu}^{2+}$   $\mu_{\text{eff}} \approx 7,93 \mu_B$  ( $\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{B}_6$ ) и  $\mu_{\text{eff}} \approx 8,03 \mu_B$  ( $\text{EuB}_6$ ), хорошо согласующимся с расчетным значением ионов  $\text{Eu}^{2+}$  в  $^8\text{S}_{7/2}$  состоянии с g-фактором  $g = 2$ :  

$$\mu = g \sqrt{J(J+1)} = 7.94 \mu_B.$$

Уменьшение  $T_C$  подтверждают данные удельного сопротивления (рис. 2), где низкотемпературный максимум сопротивления смещается с 15 К до 8.3 К для  $\text{EuB}_6$  и  $\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{B}_6$ , соответственно. Положение минимума сопротивления ( $T_0 \sim 40$  К), указывающего на установление ближнего ФМ порядка при  $T_C < T < T_0$ , практически не зависит от содержания самария. Отметим, что отклонения  $\chi(T)$  от закона Кюри-Вейсса (рис. 1), обусловленные ближним ФМ порядком, проявляются при существенно меньших температурах ( $\sim 25$  К). При этом замещение европия самарием инициирует значительный (в 20 раз!) рост остаточного сопротивления от



$RRR(\text{EuB}_6) = \rho(300\text{K})/\rho(4.2\text{K}) \approx 42.5$  [2] до  $RRR(\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{B}_6) = 2.2$ . Подобное поведение характерно для систем с электронным типом легирования (см.  $\text{EuB}_{5.95}\text{C}_{0.05}$  [4] и  $\text{Eu}_{1-x}\text{Gd}_x\text{B}_6$  [5]).

По данным холловского сопротивления при 4.2 К (рис. 2) добавление Sm приводит к росту холловской концентрации носителей в ФМ фазе с изменением коэффициента Холла от  $R_H = -0.08 \text{ см}^3/\text{Кл}$  до  $R_H = -0.022 \text{ см}^3/\text{Кл}$  и заметным уменьшением холловской подвижности (в 36 раз от  $3000 \text{ см}^2/\text{Вс}$  до  $82 \text{ см}^2/\text{Вс}$ ). В области малых полей при  $T < T_C$  на зависимостях  $\rho_H(H)$  наблюдается аномалия, амплитуда которой зависит от направления магнитного поля относительно осей кристалла. В работе обсуждается связь аномального эффекта Холла с неколлинеарным упорядочением магнитных моментов европия в  $\text{Eu}_{0.995}\text{Sm}_{0.005}\text{B}_6$ , инициированного немагнитными примесями самария.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 18-02-01152).

#### Литература

1. J. P. Mercurio, J. Etourneau et al. J. Solid State Chem. **9**, 37, **1974**
2. C. N. Guy, S. von Molnar et al. Solid State Comm. **33**, 1055, **1980**
3. В. В. Глушков, А. В. Богач et al. ЖЭТФ **132**, 150, **2007**
4. J. M. Tarascon, J. Etourneau et al. J. Appl. Phys. **51**, 574, **1980**
5. V. V. Glushkov, A. N. Samarin et al. phys. status sol. (b), **254**, 1600571, **2017**

## ПРОВЕРКА МЕТОДА КРАТЧАЙШИХ ГРАФОВ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ С КИНЕТИЧЕСКИМ УРОВНЕМ РАЗРЕШЕНИЯ

Крючков Н. П., Яковлев Е. В., Юрченко С. О.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана*

*kruchkov\_nkt@mail.ru, st.yurchenko@mail.ru*

Анализ парных корреляций в конденсированных средах позволяет установить связь между структурами и термодинамическими свойствами и, поэтому, имеет большое значение для широкого спектра систем. В цикле работ [1-4] был предложен и систематически изучен интерполяционный метод (ИМ) кратчайших графов для описания парных корреляционных функций в классических кристаллах. В результате сопоставления данных

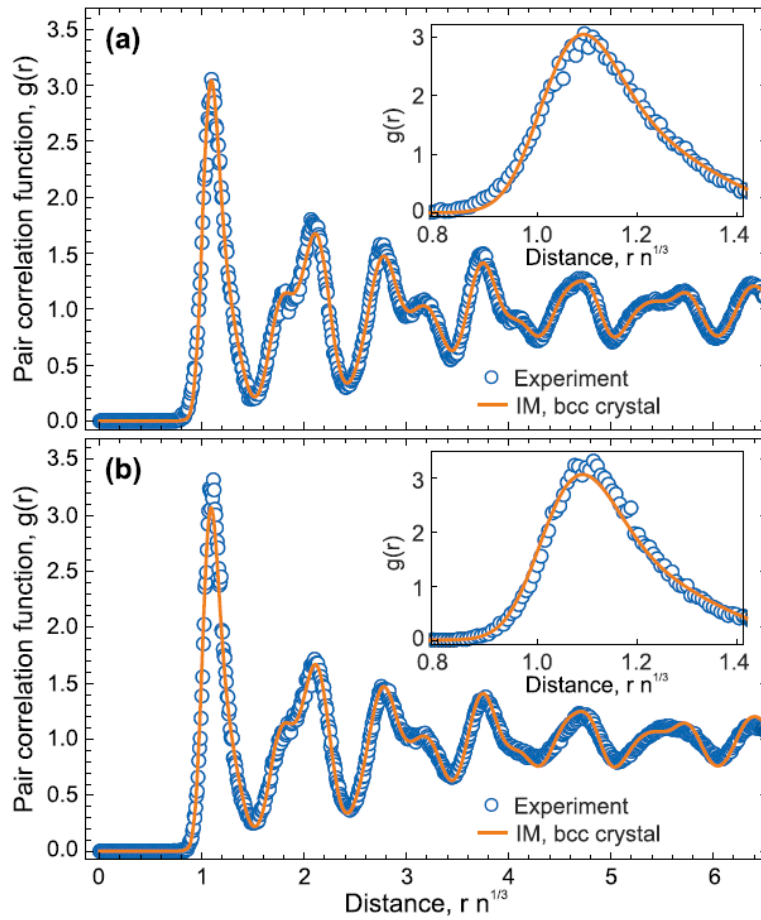


Рис.1 Сопоставление парных корреляционных функций ИМ (линии) и экспериментальных данных для трехмерных коллоидных ОЦК кристаллов (символы) при разных значениях параметра связи и экранировки: (а)  $\kappa=2.8$ ,  $\Gamma=960$ ; (б)  $\kappa=3.1$ ,  $\Gamma=1330$ .

моделирования различных систем методом молекулярной динамики и ИМ было установлено, что последний с высокой точностью описывает форму корреляционных пиков как на коротких, так и на больших расстояниях. Однако, сравнения ИМ с экспериментальными данными ранее не проводилось.

Настоящая работа посвящена проверке применимости ИМ к описанию парных корреляционных функций кристаллов, измеренных в экспериментах с кинетическим уровнем разрешения. Были использованы двумерные ( $\text{SiO}_2$  частицы диаметром 2.12 мкм в воде) и трехмерные коллоидные кристаллы (PMMA частицы диаметром 1.6 мкм, покрытые полигидроксистеариновой кислотой, в смеси декалина и тетрахлорэтилена, с объемным соотношением 6:5 соответственно) и двумерные кристаллы комплексной (пылевой) плазмы.

На графике 1 представлен результат сравнения ИМ и экспериментальных данных для случая трехмерных ОЦК кристаллов.

Наблюдается высокий уровень согласия результатов как на близких, так и на дальних корреляциях. Установлено, что высокая точность ИМ позволяет измерить параметры межчастичного взаимодействия в исследуемых системах. Результаты сравнения ИМ и экспериментов были дополнены расчетами методом молекулярной динамики с целью продемонстрировать, что: (i) отклонения от монодисперсности частиц, наблюдаемые в эксперименте, не влияют на полученные результаты; (ii) наличие непарного характера межчастичных взаимодействий может быть учтено путем ренормировки некоторых параметров ИМ, но оно не оказывает влияния на саму форму парных корреляций.

Таким образом, ИМ может эффективно использоваться для анализа парных корреляций и взаимодействий в широком спектре систем и, следовательно, представляет большой интерес для конденсированного вещества, комплексной (пылевой) плазмы, химической физики, физической химии, материаловедения и мягкой материи.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ №20-32-70186 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н. Э. Баумана.

#### Литература

1. S. O. Yurchenko, et al, J. Chem. Phys. **143**, 034506, **2015**
2. S. O. Yurchenko, et al, JPCM **28**, 235401, **2016**
3. N. P. Kryuchkov, et al, Soft Matter **14**, 2152, **2018**
4. E.V. Yakovlev, et al, J. Chem. Phys. **151**, 11450, **2019**

## СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ ПРИ 250 К В ГЦК-LaH<sub>10</sub>

Кузовников М. А.

*Институт физики твердого тела РАН*

*kuz@issp.ac.ru*

Открытие сверхпроводимости при 203 К в ОЦК-H<sub>3</sub>S [1] возродило интерес к сверхпроводникам с фононным механизмом спаривания электронов, свойства которых описываются теориями Бардина-Купера-Шриффера (БКШ) и Мигдала-Элиашберга. Хотя эти теории предсказывали, что сверхпроводимость при комнатной

температуре возможна в металлах, обладающих подходящим набором свойств, таких как наличие высокочастотных решёточных колебаний, одних этих общих теорий было недостаточно для количественного предсказания свойств и разработки новых сверхпроводников. Первопринципные расчёты на основе теории функционала электронной плотности сделали такие предсказания возможными, и, в частности, было предсказано существование нового семейства богатых водородом сверхпроводящих гидридов таких металлов, как кальций [2], иттрий и лантан [3,4]. В ГЦК-LaH<sub>10</sub> и ГЦК-YH<sub>10</sub> была предсказана сверхпроводимость с критическими температурами между 240 и 320 К при мегабарных давлениях [3,4].

В настоящей работе мы наблюдали сверхпроводимость с критической температурой около 250 К в ГЦК-LaH<sub>10</sub> при давлении около 170 ГПа [5]. На сегодняшний день это максимальная подтверждённая критическая температура для сверхпроводящих материалов. Сверхпроводимость подтверждена наблюдениями нулевого электросопротивления, наличием изотопного эффекта для ГЦК-LaD<sub>10</sub> и уменьшением критической температуры во внешнем магнитном поле. Увеличение критической температуры на 50 К по сравнению с предыдущим рекордом [1] является важным шагом на пути достижения сверхпроводимости при комнатной температуре в ближайшем будущем.

Исследование выполнено при частичной поддержке гранта РФФИ (№20-02-00638).

#### Литература

1. A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, and S. I. Shylin, *Nature*, **525**, 73, **2015**
2. H. Wang, J. S. Tse, K. Tanaka, T. Iitaka, and Y. Ma, *PNAS*, **109**, 6463, **2012**
3. F. Peng, Y. Sun, C. J. Pickard, R. J. Needs, Q. Wu, and Y. Ma, *Phys. Rev. Lett.*, **119**, 107001, **2017**
4. H. Liu, I. I. Naumov, R. Hoffmann, N. W. Ashcroft, and R. J. Hemley, *PNAS*, **114**, 6990, **2017**
5. A. P. Drozdov, P. P. Kong, V. S. Minkov, S. P. Besedin, M. A. Kuzovnikov, S. Mozaffari, L. Balicas, F. F. Balakirev, D. E. Graf, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, D. A. Knyazev, M. Tkacz, and M. I. Erements, *Nature*, **569**, 528, **2019**

## ФАЗОВАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ СОЛЕГИРОВАННЫХ ОКСИДОМ СКАНДИЯ И ИТТЕРБИЯ

Борик М. А.<sup>1</sup>, Колотыгин В. А.<sup>1,2</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>,  
Рябочкина П. А.<sup>3</sup>, Табачкова Н. Ю.<sup>1,4</sup>, Волкова Т. В.<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup>Институт физики твердого тела РАН

<sup>3</sup>Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева

<sup>4</sup>Национальный исследовательский технологический университет  
«МИСиС»

Твердые растворы  $ZrO_2-Sc_2O_3$  обладают наибольшей ионной проводимостью среди материалов на основе диоксида циркония. Поэтому данные материалы являются перспективными для использования в качестве твердого электролита в твердооксидных топливных элементах. Сложность использования диоксида циркония стабилизированного оксидом скандия заключается в нестабильности транспортных характеристик материала в течение времени работы электрохимического устройства. Причины нестабильности связаны с метастабильностью и полифазностью материала, что при высоких рабочих температурах приводит к фазовым изменениям и снижению кислород ионной проводимости материалов. Одним из методов обеспечения стабильности является дополнительное легирование твердых растворов  $ZrO_2-Sc_2O_3$  примесями редкоземельных элементов, которые способствуют получению однофазных твердых растворов стабильных в области рабочих температур твердых электролитов.

Целью настоящей работы является исследование стабильности фазового состава и физико-химических свойств монокристаллов  $(ZrO_2)_{0.91-x}(Sc_2O_3)_{0.09}(Yb_2O_3)_x$ , где  $x=0-3$  мол.%, при отжиге на воздухе. Температура отжига кристаллов  $1000^\circ C$ , время отжига 400 часов.

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

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (гранты № 16-13-00056 и 19-72-10113).

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПИННИНГА НА ДИНАМИКУ В 2D СИСТЕМЕ КОЛЛОИДНОЙ СУСПЕНЗИИ ВО ВНЕШНЕМ ВРАЩАЮЩЕМСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Кушнир И. А.<sup>1,2</sup>, Яковлев Е. В.<sup>1</sup>, Юрченко С. О.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д.5, Москва, Россия

<sup>2</sup>ИФВД РАН, Калужское ш., д.14, Москва, Россия

Системы с управляемым межчастичным взаимодействием представляют значительный интерес, в первую очередь, из-з широкого спектра возможностей манипуляций ансамблями микрочастиц. Здесь же следует отметить исследования общих явлений, протекающих в классической конденсированной материи, с пространственным разрешением отдельных частиц, а также исследования, нацеленные на разработку новых функциональных материалов. На сегодняшний день при помощи систем с управляемыми взаимодействиями изучено множество процессов и явлений, таких как плавление [1], кристаллизация [2], перенос тепла [3], стеклование [4] и спинодальный распад [5]. Коллоидные суспензии во внешнем вращающемся электрическом поле занимают особое место среди систем с регулируемым межчастичным взаимодействием [6], т.к. открывают технологичный путь для фундаментальных и прикладных исследований. В настоящей работе при помощи коллоидных систем в электрических вращающихся полях исследовалось влияние пиннинга на динамику двумерной системы с регулируемым межчастичным притяжением.

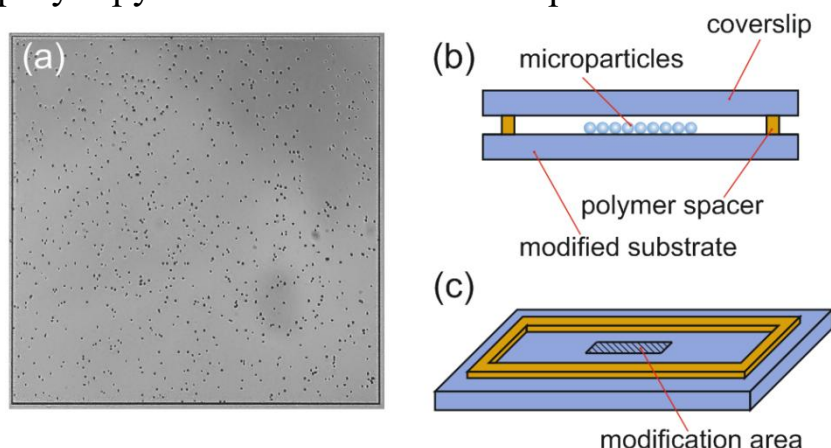


Рис. 1 (а) Фото и (b,c) схематичное изображение модифицированной подложки, использовавшейся в экспериментах по исследованию пиннинга в коллоидных системах во внешних вращающихся электрических полях.

Экспериментальная установка и методика, использованная в настоящей работе, описаны в работе [6]. Для экспериментальной кюветы использовались модифицированные подложки, представляющие собой стеклянные пластинки с нанесенными при помощи фемтосекундного лазера центрами пиннинга (лунками), таким образом, что эти центры находятся в узлах кристаллической решетки коллоидного кристалла. Фотография и схематичное изображение модифицированной подложки представлены на Рис. 1.

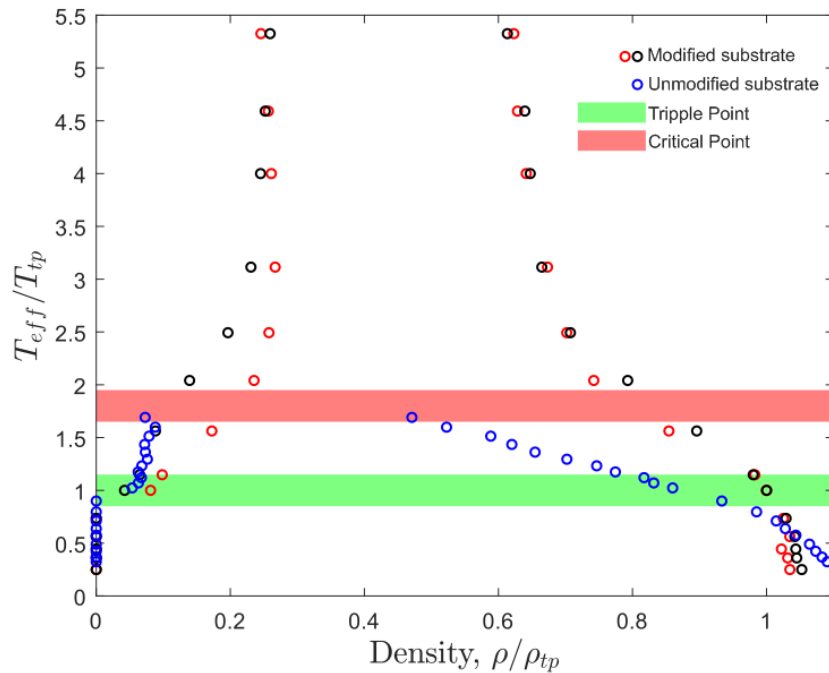


Рис.2 Экспериментальные фазовые диаграммы двумерных коллоидных суспензий во вращающихся электрических полях

В результате работы, найдены экспериментальные фазовые диаграммы для двумерных коллоидных систем во внешних вращающихся электрических полях (Рис. 2), полученные в экспериментах с обыкновенной (синие кружки) и модифицированной подложкой (красные и черные кружки).

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 19-12-00092 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н. Э. Баумана.

#### Литература

1. J. D. Williams, et al. *Physical Review E.*, **86**, 4, 046401, **2012**
2. M. Rubin- Zuzic, et al. *Nature Phys.*, **2**, 181, **2006**
3. S. Nunomura, et al., *Phys. Rev. Let.*, **95**, 2, 025003, **2005**
4. H. Huang, et al., *Phys. Plasmas.*, **26**, 1, 013702, **2019**



5. C. Killer, et al., Phys. Rev. Let., **116**, 11, 115002, **2016**
6. Yakovlev E. V. et al. Sci. Rep., **7**,1,13727, **2017**

## ПРЕДСКАЗАНИЕ СТРУКТУРЫ И СТАБИЛЬНОСТИ НАНОКЛАСТЕРОВ С ПЕРЕМЕННЫМ СОСТАВОМ.

Лепешкин С. В.<sup>1,2</sup>, Батурин В. С.<sup>1,2</sup>, Успенский Ю. А.<sup>2</sup>, Оганов А. Р.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Сколковский Институт Науки и Технологии, Москва, Россия

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

S.Lepeshkin@skoltech.ru

Был разработан новый метод для одновременного предсказания атомной структуры и стабильности нанокластеров в широком диапазоне размеров и составов. Эффективность метода связана с часто встречающимся сходством структур кластеров с близкими составами. Проведенное тестирование показало ускорение расчетов в 5-50 раз по сравнению с используемым ранее поочередным расчетом устойчивых структур кластеров отдельно для каждого состава из заданной области. Новый алгоритм внедрен в программный комплекс USPEX [1].

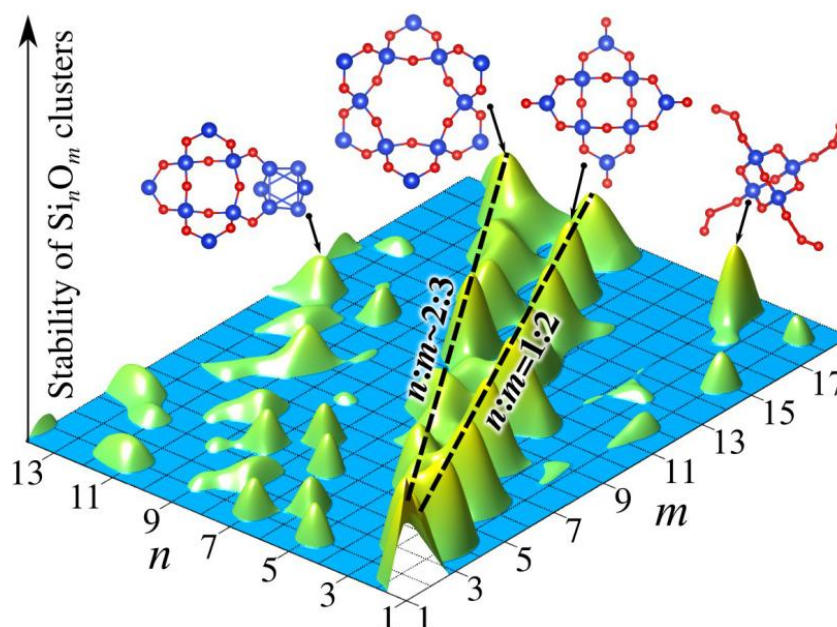


Рис. 1. Карта стабильности кластеров  $\text{Si}_n\text{O}_m$ . Также показаны несколько кластеров с высокой устойчивостью.

С помощью разработанного метода была впервые проведена глобальная оптимизация 315  $\text{Si}_n\text{O}_m$  кластеров ( $1 \leq n \leq 15$  and  $0 \leq m \leq 20$ ) с



использованием DFT расчетов. Данная система была выбрана в связи с практической важностью и большим структурным разнообразием. Была исследована стабильность  $\text{Si}_n\text{O}_m$  кластеров, для чего вычислялась минимальная производная второго порядка энергии кластера по количеству атомов Si и O ( $\Delta_{\min}(n, m)$ ). На рис. 1 показан график  $\Delta_{\min}(n, m)$ , а также несколько устойчивых кластеров.

Полученная карта показывает существование «хребтов» и «островов» стабильности, соответствующих наиболее устойчивым кластерам. Помимо ожидаемых  $(\text{SiO}_2)_n$ , были найдены кластеры  $\text{Si}_n\text{O}_m$  с  $n:m \sim 2:3$ , а также ряд других стабильных («магических») кластеров (например,  $\text{Si}_4\text{O}_{18}$ ), которые могут быть важны для различных приложений [1].

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 19-02-00394).

#### Литература

1. S. V. Lepeshkin, V. S. Baturin, Yu. A. Uspenskii, and Artem R. Oganov, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2019**, 10 (1), pp 102–106.

## РАСЧЁТ УСТАНОВКИ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ МЕЖДУ ЧАСТИЦАМИ В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

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

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, 105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5*  
*libetpa@gmail.com, st.yurchenko@mail.ru*

Коллоидные суспензии с регулируемым взаимодействием между частицами, которое создается с помощью вращающихся электрических [1] и магнитных полей [2,3], привлекают особое внимание из-за их прикладной и фундаментальной значимости. Особый интерес представляет формирование конденсированной фазы из коллоидных частиц во вращающемся магнитном поле. Варьируя угол прецессии конически-вращающихся полей, можно получать различные коллоидные структуры. Известно [4, 5], что при углах прецессии чуть меньше "магического" ( $54.7^\circ$ ) частицы притягиваются на коротких расстояниях и отталкиваются вдали (взаимодействие барьерного типа). В действительности, такое взаимодействие должно приводить к появлению равновесных микрофаз с выраженной ролью

многочастичного взаимодействия, однако на сегодняшний день эта проблема остается далекой от полного понимания, что подчеркивает необходимость детальных экспериментальных исследований.

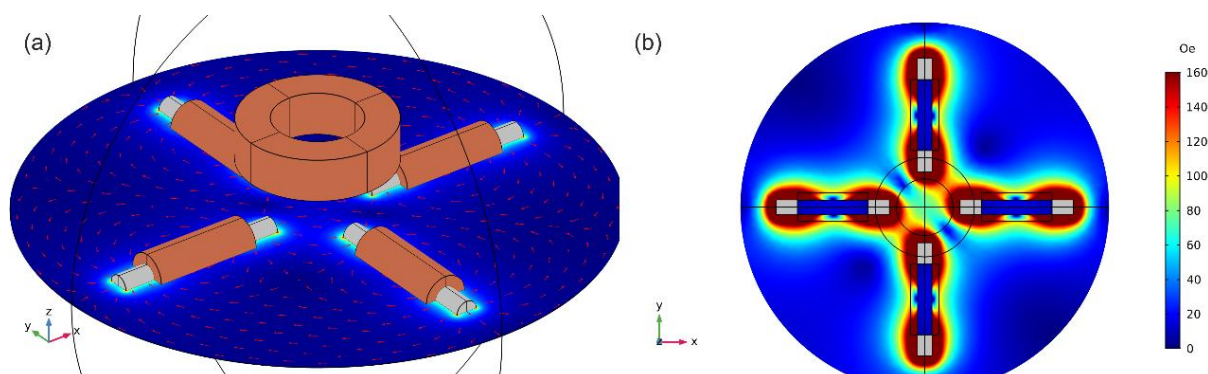


Рис. 1. Аксонометричная трёхмерная численная модель: Распределение поля в горизонтальной плоскости. Красные силовые линии показывают направление магнитного поля.

Крайне важным этапом при разработке экспериментальной установки, является проектирование и оптимизация при помощи численного моделирования. В нашей работе, с использованием метода конечных элементов (МКЭ), была создана численная модель экспериментальной установки, представленная на Рис. 1. Разбивая трёхмерную модель на конечное число подобластей, решены уравнения магнитостатики и получены детальные распределения полей.

Экспериментальная установка состоит из четырёх многослойных катушек, намотанных на сердечник, в горизонтальной плоскости и двух вертикальных катушек на каркасе. На обмотку подается синусоидальный ток, что приводит к образованию вращающегося магнитного поля в центре. Исследуемый образец, помещённый на стеклянную подложку, освещается внешним источником света. Видеосъемка осуществляется при помощи оптического микроскопа и видеокамеры. В настоящее время на созданной установке начат цикл исследований кинетики спиноподобного распада, фазовых переходов между различными монослойными кристаллическими структурами.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 19-12-00092 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н.Э. Баумана.

#### Литература

1. Yakovlev E. V. et al. Tunable two-dimensional assembly of colloidal particles in rotating electric fields //Scientific reports. – 2017. – Т. 7. – №. 1. – С. 1-10.

2. Du D. et al. Generating an in situ tunable interaction potential for probing 2-D colloidal phase behavior //Soft Matter. – **2013**. – Т. 9. – №. 29. – С. 6867-6875.
3. Byrom J., Biswal S. L. Magnetic field directed assembly of two-dimensional fractal colloidal aggregates //Soft Matter. – **2013**. – Т. 9. – №. 38. – С. 9167-9173.
4. Pham A. T. et al. Phase diagram and aggregation dynamics of a monolayer of paramagnetic colloids //Physical Review E. – **2017**. – Т. 95. – №. 5. – С. 052607.
5. Komarov K. A., Kryuchkov N. P., Yurchenko S.O. Tunable interactions between particles in conically rotating electric fields // Soft Matter. – **2018**. – Т. 14. – №. 47. – С. 9657-9674.

## **РОЛЬ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В САМОСБОРКЕ МЯГКИХ КОЛЛОИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ С РЕГУЛИРУЕМЫМ МЕЖЧАСТИЧНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ**

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

*МГТУ им. Н. Э. Баумана, 105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5  
libetpa@gmail.com*

Регулируемые взаимодействия в коллоидных суспензиях, вызванные вращающимися электрическими [1, 2] или магнитными [3] полями, являются гибким и многообещающим инструментом для самосборки мягкой материи [4], а также для фундаментального изучения общих проблем физики твердых тел, таких как фазовые переходы [5], нуклеация [6] и других общих явлений физики конденсированного состояния. В работах [1, 7] было показано, что в двумерных коллоидных системах в плоских вращающихся полях взаимодействия между частицами имеют дальнее притяжение, но на малых расстояниях взаимодействие остается плохо изученным. Изучение ближней части взаимодействия осложняется двумя фактами. Во-первых, это взаимодействие имеет ярко выраженную трех-частичную природу. Другой факт заключается в том, что частицы в системах вращаются, что крайне сложно обнаружить в эксперименте.

Внешнее электрическое поле, вращающееся с высокой частотой, воздействует на коллоидную суспензию так, что появляется сдвиг между векторами внешнего электрического поля и собственной

поляризации частицы, и их векторное произведение приводит к возникновению крутящего момента вдоль вертикальной оси, и частица начинает вращаться. Таким образом, вращение частиц должно влиять на межчастичное взаимодействие и на суммарное гидродинамическое взаимодействие.

В рамках эксперимента наблюдались пары микрочастиц, помещенные во вращающееся электрическое поле. Поле генерирует взаимодействие между частицами посредством диполь-дипольного взаимодействия, и взаимодействие может регулироваться путем управления параметрами электрического поля. Результаты эксперимента были записаны с использованием оптической видео микроскопии и последующей компьютерной обработкой.

Численное исследование коллоидной суспензии во внешнем вращающемся электрическом поле проводилось с помощью метода конечных элементов (МКЭ). Используя созданную численную модель, мы рассчитали гидродинамические величины при постоянном крутящем моменте, реализованном вдоль вертикальной оси, и при постоянной угловой скорости вращения коллоидной частицы. Обработывая экспериментальные данные, мы установили скорость вращения коллоидного кластера и сравнили ее с расчетными численными данными.

В работе показано, как создать численную модель для исследования вращающихся коллоидных частиц, погруженных в воду, и установить гидродинамические величины, такие как силы, моменты и угловую скорость вращения кластера. В работе исследуются три типа конфигураций частиц: пара, тройка-треугольник и тройка-линия. Комбинации более высокого порядка можно не рассматривать, поскольку их вклад в гидродинамическое взаимодействие незначителен. Показана согласованность численных и экспериментальных данных и найдена зависимость угловой скорости вращения частиц от межчастичного расстояния.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ №20-32-70186 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н. Э. Баумана.

#### Литература

1. Komarov K. A., Kryuchkov N. P., Yurchenko S. O. *Soft Matter*. – **2018**. – Т. 14. – №. 47. – С. 9657-9674.
2. Komarov K. A., Yarkov A. V., Yurchenko S. O. *The Journal of Chemical Physics*. – **2019**. – Т. 151. – №. 24. – С. 244103.

3. Grzybowski B. A., Stone H. A., Whitesides G. M. Nature. – 2000. – Т. 405. – №. 6790. – С. 1033-1036.
4. Whitesides G. M., Grzybowski B. Science. – 2002. – Т. 295. – №. 5564. – С. 2418-2421.
5. Kryuchkov N. P. et al. The Journal of chemical physics. – 2019. – Т. 150. – №. 10. – С. 104903.
6. Li B., Zhou D., Han Y. Nature Reviews Materials. – 2016. – Т. 1. – №. 2. – С. 1-13.
7. Yakovlev E. V. et al. Scientific reports. – 2017. – Т. 7. – №. 1. – С. 1-10.

## **ОБРАБОТКА МАГНИТОЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ ДЛЯ ОБРАЗЦОВ FE/SiO<sub>2</sub>/SI РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНЫ**

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

<sup>1</sup>*Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН - обособленное  
подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН*

<sup>2</sup>*Сибирский федеральный университет*

*maximo.a@mail.ru*

Нами проведен комплекс работ по развитию метода магнитоэллипсометрии для его применения в условиях сверхвысоковакуумного комплекса, разработанного в ИФ СО РАН с целью синтеза и анализа свойств тонкопленочных образцов с ферромагнитными слоями. В итоге разработана методика нахождения тензора диэлектрической проницаемости по экспериментальным магнитоэллипсометрическим данным для различных моделей отражающих ферромагнитных наноструктур, а именно:

1. Модель однородной полубесконечной среды при исследовании объемного ферромагнитного образца на немагнитной подложке (аналитический и численный [1] метод определения компонент тензора диэлектрической проницаемости);
2. Модель «среда-ферромагнитная пленка-немагнитная подложка подложка» [2];
3. Модель многослойной среды для образца с одним ферромагнитным слоем [3].

При разработке методики мы в первую очередь отталкивались от характеристик прибора [4], соответственно, вышеперечисленные модели математически верны только для экваториальной конфигурации магнитооптического эффекта Керра, подходят для анализа спектральных измерений в оптическом диапазоне. Мы

учитывали, что проведение эллипсометрических измерений с приложением магнитного поля и без него происходит в рамках одного эксперимента в сверхвысоковакуумной камере. А также мы принимали во внимание наличие уже разработанных методов для анализа диагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости, например [5], успешно применяемых при работе на имеющейся установке. Нашей целью было главным образом связать данные, получаемые от экспериментальной установки (эллипсометрические углы и их изменения при приложении магнитного поля) и коэффициенты отражения образца для различных моделей, поскольку именно данная связь определяет недиагональные компоненты тензора диэлектрической проницаемости.

Имеющаяся методика позволяет теперь проводить экспериментальные магнитоэллипсометрические исследования на различных образцах. В данном докладе будет рассказано об исследовании тонких поликристаллических пленок Fe/SiO<sub>2</sub>/Si с разными толщинами слоя железа, в том числе мы поговорим о следующих моментах:

1. Экспериментальные образцы и методика проведения эксперимента [6];

2. Обработка экспериментальных магнитоэллипсометрических данных для различных моделей отражающих ферромагнитных наноструктур:

- Анализ роли толщины скин-слоя Fe,
- Анализ влияния интерфейсов SiO<sub>2</sub>/Fe и Fe/вакуум;

3. Анализ диагональных и недиагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости Fe.

В результате обработки данных спектральных магнитоэллипсометрических измерений определены комплексные диагональные и недиагональные компоненты тензора диэлектрической проницаемости магнитного слоя для образцов Fe/SiO<sub>2</sub>/Si с разными толщинами слоя ферромагнетика в спектральном диапазоне 1.38-3.45 эВ. Приведено сопоставление полученных результатов с литературными данными других авторов и расчетом тензора диэлектрической проницаемости Fe в рамках теории функционала плотности.

Работа выполнена при государственной поддержке научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых (ведущий ученый — Фарле Михаэль Виктор Николаус), договор № 075-15-2019-1886.

## Литература

1. O.A. Maximova, et al., JMMM, **440**, 196–198, **2017**.
2. O. A. Maximova, et al., IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, **155**, N 1, 012030, **2016**.
3. Maximova O.A., et al., DDF, **386**, 131-136, **2018**.
4. Д.В. Шевцов и др. ПТЭ, **5**, 146–150, **2017**.
5. I.A. Tarasov, et al., Tech. Phys. **57**, 1225, **2012**.
6. O. A. Maximova, et al., JETP Letters, **110**, No. 3, 166–172, **2019**

## РЕНТГЕНОВСКОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ SiV ЦЕНТРОВ В КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНКАХ АЛМАЗ-YAG:Ce

Мартьянов А. К.<sup>1</sup>, Седов В. С.<sup>1</sup>, Кузнецов С. В.<sup>1</sup>,  
Каменских И. А.<sup>2</sup>, Ральченко В. Г.<sup>1,3</sup>

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

<sup>2</sup>*МГУ имени М. В. Ломоносова, физический факультет*

<sup>3</sup>*Харбинский политехнический университет*

*art.martyanov@gmail.com*

Алмаз обладает рекордной теплопроводностью, прочностью, твёрдостью, химической инертностью, стойкостью к радиационным излучениям [1], и часто используется в качестве прозрачного материала для изготовления окон и линз, выдерживающих высокие мощности проходящего излучения [2, 3]. Попытка создания рентгенолюминесцентного материала на основе сформированных в алмазе примесных центрах окраски продемонстрировала низкие величины световых выходов рентгенолюминесценции [4]. Другим подходом является создание рентгенолюминесцентных алмазных композитов, представляющих собой наночастицы соединений редкоземельных элементов (фторидов европия), внедрённых в поликристаллические алмазные плёнки [5, 6]. Было продемонстрировано, что композитный материал обладает интенсивной фото- и рентгенолюминесценцией, линейно зависящей от количества внедрённых наночастиц, однако европий обладает длительным временем жизни люминесценции (~0.5 мс), в связи с чем необходим переход к люминесцентным ионам, обладающим наносекундной длительностью затухания фотолюминесценции, наиболее перспективным элементом из которых является церий (Ce).

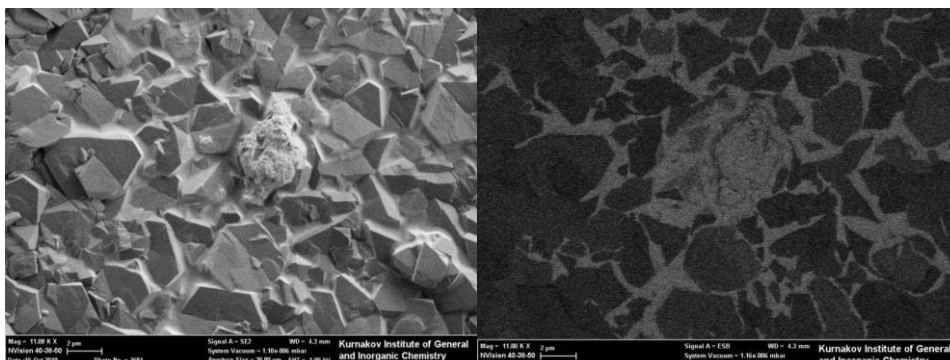


Рис. 1. Изображение РЭМ полученного композита (слева); в режиме регистрации обратно-рассеянных электронов (справа).

Получение такого 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 сформированная 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).

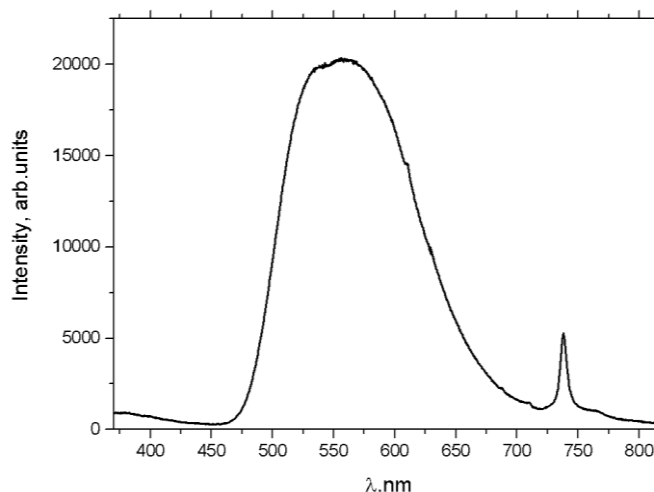


Рис. 2. Спектр рентгенолюминесценции композитной плёнки алмаз-YAG:Ce при комнатной температуре и возбуждении 17,1 кэВ.

Полученные образцы обладают интенсивной рентгенолюминесценцией на длине волны 560 нм (рис. 2) и могут использоваться в качестве визуализаторов мощного рентгеновского



излучения, которое получают с помощью синхротронов или лазеров на свободных электронах.

Таким образом разработан метод получения новых рентгенолюминесцентных алмазных композитов, заключающийся во внедрении наночастиц YAG:Ce в поликристаллические алмазные плёнки непосредственно в процессе плазмохимического осаждения алмаза из газовой фазы. Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 20-32-70074).

#### Литература

1. Inyushkin A.V. et al. Physical Review B, **97(14)**, 144305, **2018**.
2. Kononenko T.V. et al. Applied Physics A, **122(3)**, 152, **2016**
3. Terentyev S. et al. Journal of synchrotron radiation, **24(1)**, 103-109, **2017**
4. Osadchy A. V. et al. Applied Physics A, **124(12)**, 807, **2018**
5. Sedov V. S. et al. Diamond and Related Materials, **72**, 47-52, **2017**
6. Sedov, V. et al. ACS Applied Nano Materials, **3(2)**, 1324-1331, **2020**

### ФАЗЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ В ЭВТЕКТИЧЕСКИХ СПЛАВАХ $Al_{90}Y_{10}$ , $Al_{86}Ni_6Gd_4Tb_2Er_2$

Меньшикова С. Г.<sup>1</sup>, Бражкин В. В.<sup>2</sup>, Суслов А. А.<sup>1</sup>, Ладьянов В. И.<sup>1</sup>,  
Черепанов П. Ф.<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>ИФВД РАН, г.Москва, г.Троицк

*svetlmenh@mail.ru*

Давление и температура являются основными термодинамическими параметрами, которые определяют состояние вещества и его изменение. Применение при затвердевании расплава высокого давления (несколько ГПа) открывает дополнительные возможности синтеза новых материалов с уникальными свойствами.

Цель настоящей работы состояла в изучении возможности формирования новых фаз высокого давления в стеклообразующих эвтектических сплавах составов  $Al_{90}Y_{10}$ ,  $Al_{86}Ni_6Gd_4Tb_2Er_2$ .

Образцы для исследований получали в камере высокого давления типа «тороид» в зависимости от температуры закалки (1770 К) и высокого давления (от 2 до 7 ГПа) при охлаждении со скоростью 1000 град/с. Плавление проводили пропусканием переменного тока через образец. Фазовый состав, морфологию и размер структурных

составляющих сплавов исследовали методами рентгеноструктурного анализа, оптической и электронной микроскопии.

Фазовый состав и условия получения образцов представлены в Таблицах 1 и 2. В структуре исходного<sup>1</sup> сплава  $Al_{90}Y_{10}$  присутствуют первичные кристаллы низкотемпературной фазы  $Al_3Y$  (НТ) длиной  $\sim 300$  мкм и толщиной 10 мкм и двойная нерегулярная эвтектика ( $\alpha-Al+Al_3Y(НТ)$ ). В исходном сплаве  $Al_{86}Ni_6Gd_4Tb_2Er_2$  - в форме пластин первичные кристаллы  $Al_{19}Ni_5(Tb,Gd)_3$  длиной  $\sim 400$  мкм и толщиной 100 мкм и тройная нерегулярная эвтектика ( $\alpha-Al+Al_3(Gd,Er)+Al_{19}Ni_5(Tb,Gd)_3$ ).

В интервале давлений 2-5 ГПа расплав  $Al_{90}Y_{10}$  затвердевает в две стадии. Первоначально выделяется фаза  $Al_3Y$  (НТ) в форме кубоидов размером  $\sim 5$  мкм без дефектов и трещин, далее формируется регулярная дисперсная эвтектика ( $\alpha-Al+Al_3Y(НТ)$ ). Повышение давления до 7 ГПа приводит к формированию двух первичных фаз: новой в форме звезд фазы  $Al_3Y^*$  с кубической структурой, период решетки  $a=0.4252\pm 0.0002$  нм (на рентгенограмме линии фазы смещены в область бóльших углов  $2\theta$  по отношению к известной высокотемпературной фазе данного состава) и фазы  $Al_3Y$  (НТ) в форме пластин.

Для сплава  $Al_{86}Ni_6Gd_4Tb_2Er_2$  затвердевание под давлением 3 и 7 ГПа приводит к изменению его фазового состава. При 3 ГПа сплав кристаллизуется с формированием двух фаз:  $\alpha-Al$ ,  $Al_4Ni(Tb,Gd)$ . Er, предположительно, растворяется в Al. Увеличение давления до 7 ГПа приводит к формированию новых фаз:  $Al_3Er^*$  с кубической структурой, период решетки  $a=0.4255\pm 0.0003$  нм (на рентгенограмме линии данной фазы смещены в область меньших углов  $2\theta$ , по отношению к известной фазе  $Al_3Er$ ). Вторая новая фаза\* близка по составу к фазе  $GdNi_2$  (с15) с кубической структурой (линии фазы\* смещены в область меньших углов  $2\theta$  по отношению к фазе  $GdNi_2$ , присутствуют дополнительные линии).

Таблица 1 Фазовый состав и условия получения сплава  $Al_{90}Y_{10}$

№	Условия получения	Фазовый состав
1	Исходный образец	$\alpha-Al$ , $Al_3Y$ (гекс., hP8)
2	2-5 ГПа (1770 К)	$\alpha-Al$ , $Al_3Y$ (гекс., hP8)
3	7 ГПа (1770 К)	$\alpha-Al$ , $Al_3Y$ (гекс., hP8), $Al_3Y^*$ (куб., hR12)

<sup>1</sup> Исходные сплавы  $Al_{90}Y_{10}$  и  $Al_{86}Ni_6Gd_4Tb_2Er_2$  получали сплавлением металлов в корундовых тиглях в печи Таммана с выпуском в чугунную форму при атмосферном давлении.

Таблица 2 Фазовый состав и условия получения сплава Al<sub>86</sub>Ni<sub>6</sub>Gd<sub>4</sub>Tb<sub>2</sub>Er<sub>2</sub>

№	Условия получения	Фазовый состав
1	Исходный образец	$\alpha$ -Al; Al <sub>3</sub> (Gd,Er) (гекс., hP8/3); Al <sub>19</sub> Ni <sub>5</sub> (Tb,Gd) <sub>3</sub> (орт., оС108/4)
2	3 ГПа (1770 К)	$\alpha$ -Al; Al <sub>4</sub> Ni(Tb,Gd) (орт., оС24/5)
3	7 ГПа (1770 К)	$\alpha$ -Al, Al <sub>3</sub> Er* (куб., сP4/2), фаза*

Таким образом, используя метод термобарической обработки расплава, при давлении 7 ГПа и температуре 1770 К получены новые кристаллические фазы. При всех рассмотренных условиях структура полученных образцов мелкокристаллическая, плотная, однородная с высокими прочностью и твердостью.

Полученные результаты позволяют сделать заключение о том, что метод высоких давлений является перспективным для получения новых соединений в сплавах на основе алюминия с переходными и редкоземельными металлами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 18-02-00643а), в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ (№ АААА-А17-117022250039-4).

## ОБЩЕЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ ВБЛИЗИ ЛИНИИ НАСЫЩЕНИЯ

Мирзиярова Д. А., Мокшин А. В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,*

*Институт физики, г.Казань, Россия*

*mirziyarova\_diana@mail.ru*

В современном мире область применения щелочных металлов чрезвычайно велика. Так, например, щелочные металлы находят свое применение в медицине, пищевой промышленности, оптике и электронике, металлургии и атомной энергетике. Такое широкое применение щелочные металлы получили благодаря своим уникальным характеристикам и свойствам, таким как высокие значения температур кипения, широкий диапазон температур, соответствующих равновесной жидкой фазе, высокая теплопроводность, высокие значения теплоты испарения (парообразования) [1]. Низкая температура плавления щелочных

металлов делает их незаменимыми материалами для осуществления теплообмена в ядерных реакторах, в соплах ракет и в других технических устройствах, работающих при экстремально высоких температурах. В связи с этим имеется большая необходимость в знании термодинамических свойств щелочных металлов в неупорядоченных конденсированных фазах: в фазе равновесного расплава и в газовой фазе.

Целью настоящего исследования являлось рассмотрение возможности построения *общего уравнения состояния* щелочных металлов (лития Li, натрия Na, калия K, рубидия Rb, цезия Cs) для широких диапазонов температур, давлений и плотностей, соответствующих газовой фазе. Отметим, что известные на сегодняшний день модели уравнения состояния щелочных металлов являются очень специфическими. Применимость этих моделей ограничивается лишь частными системами, а также весьма узкими областями равновесных жидкой и газовой фаз [2-5]. Настоящее исследование опиралось на экспериментальные данные по термодинамическим свойствам (плотность, температура, давление) щелочных металлов [1]. В ходе анализа экспериментальных данных получено ряд интересных и значимых, на наш взгляд, результатов. Получено три уравнения состояния в аналитическом виде, которые воспроизводят экспериментальные данные с высокой точностью. Примечательно, что эти уравнения является общими для всех рассмотренных систем, что, кроме всего прочего, непосредственно указывает на реализацию концепции термодинамического подобия [6]. Полученные уравнения состояния определяются достаточно простыми выражениями, что позволяет их использовать в непосредственных теоретических расчетах и в оценке различных физических свойств щелочных металлов: для определения термических коэффициентов, механических констант и т.д., для определения термодинамических свойств в областях экстремально высоких температур.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-02-00407.

#### Литература

1. Н.Б. Варгафтик, Наука, **1972**
2. G. Ihm, Y. Song, E. A. Mason, J. Chem. Phys., **94**, 3839, **1991**
3. И.В. Александров, В.Н. Качинский, И.Н. Макаренко, С.М. Стишов, ЖЭТФ, **38**, 336, **1982**
4. F. Yousefia, H. Karimi, Z. Gandomkar, Fluid Phase Eq., **370**, 43, **2014**

5. H. Eslami, High Pres., **33**, 237, **2001**
6. А.В. Мокшин, Р.М. Хуснутдинов, А.Р. Мусабирова, А.Р. Ахмерова, ЖЭТФ, **106**, 343, **2017**

## НАКАЧКА МАГНИТНОГО ПОТОКА В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ КОЛЬЦЕ С ДЖОЗЕФСОНОВСКИМ $\Psi$ -КОНТАКТОМ

Миронов С. В.<sup>1</sup>, Буздин А. И.<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>*University Bordeaux, LOMA UMR-CNRS 5798, Talence Cedex, France*  
*svmironov@ipmras.ru*

Доклад посвящен теоретическому анализу динамики магнитного потока в одноконтатных СКВИДах на основе джозефсоновских S/F/HM/F/S переходов с оптически-контролируемой прецессией намагниченности в одном из F-слоев (здесь S – сверхпроводник, F – обычный ферромагнетик, HM – ферромагнетик с полной поляризацией электронов проводимости по спину, half-metal). Ранее в ряде теоретических работ для S/F/HM/F/S систем был предсказан аномальный эффект Джозефсона, то есть возникновение ненулевой разности фаз между сверхпроводящими берегами в основном состоянии (см., например, [1-4]). Величина такой спонтанной разности фаз совпадает с углом  $\psi$  между проекциями магнитных моментов в F слоях на плоскость, перпендикулярную оси квантования спина в полуметалле. Мы показали, что если включить многослойную S/F/HM/F/S структуру в замкнутый сверхпроводящий контур, то вращение магнитного момента в одном из F слоев сопровождается аккумуляцией джозефсоновской разности фаз (не ограниченной величиной  $2\pi$ ) и, соответственно, «накачкой» магнитного потока через сверхпроводящий контур [5]. Данный эффект фазы Берри специфичен для S/F/HM/F/S контактов (так называемых  $\psi$ -контактов) и не наблюдается в широко исследуемых S/F/S системах с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Далее показано, что прецессия магнитного момента в одном из двух F слоев, вызванная, например, микроволновым излучением, приводит к контролируемым переключением между сверхпроводящими состояниями кольца, характеризующимися различными значениями завихренности. Эти состояния соответствуют различному числу квантов магнитного потока, захваченных в кольце. При этом для фиксированной индуктивности кольца, выбирая частоту излучения в определенных интервалах, можно добиться ситуации, когда при выключении излучения система после релаксации придет в состояние с наперед заданным числом квантов

потока вне зависимости от фазы волны в момент выключения. Таким образом, последовательное облучение одного из F слоев импульсами с разными частотами позволяет осуществлять обратимые контролируемые переключения между двумя состояниями, отличающимися топологическим индексом (завихренностью). Описанное явление является перспективным для создания на его основе топологически защищенной ячейки памяти, в которой разные значения бита информации соответствуют разному значению квантов магнитного потока в кольце. Важно подчеркнуть, что описанные переключения в кольце с  $\psi$ -контактом не требуют наличия внешнего постоянного магнитного поля. Данное обстоятельство может позволить решить одну из наиболее актуальных проблем устройств быстрой одноквантовой логики – невозможность их миниатюризации из-за необходимости приложения гигантских локализованных магнитных полей для изменения квантового состояния.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 18-72-10027).

#### Литература

1. V. Braude and Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. Lett., **98**, 077003, **2007**
2. M. Eschrig, T. Löfwander, T. Champel, J. C. Cuevas, J. Kopp, and G. Schön, J. Low Temp. Phys., **147**, 457, **2007**
3. M. Eschrig and T. Löfwander, Nat. Phys., **4**, 138, **2008**
4. R. Grein, M. Eschrig, G. Metalidis, and G. Schön, Phys. Rev. Lett., **102**, 227005, **2009**
5. S. Mironov, H. Meng, A. Buzdin, Appl. Phys. Lett. **116**, 162601, **2020**

## ОПИСАНИЕ ПАРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В НИКЕЛЕ И МЕДИ ПРИ ПОМОЩИ ОБОБЩЕННОГО МЕТОДА КРАТЧАЙШИХ ГРАФОВ

Мистрюкова Л. А., Крючков Н. П., Юрченко С. О.

*МГТУ им. Н.Э. Баумана*

*st.yurchenko@mail.ru, kryuchkov\_nkt@mail.ru*

Поиск взаимосвязи между структурой вещества, его коллективной динамикой, а также термодинамическими свойствами является важной проблемой, имеющей большое значение, как для фундаментальных, так и для прикладных исследований в области физики конденсированного состояния. В частности, понимание

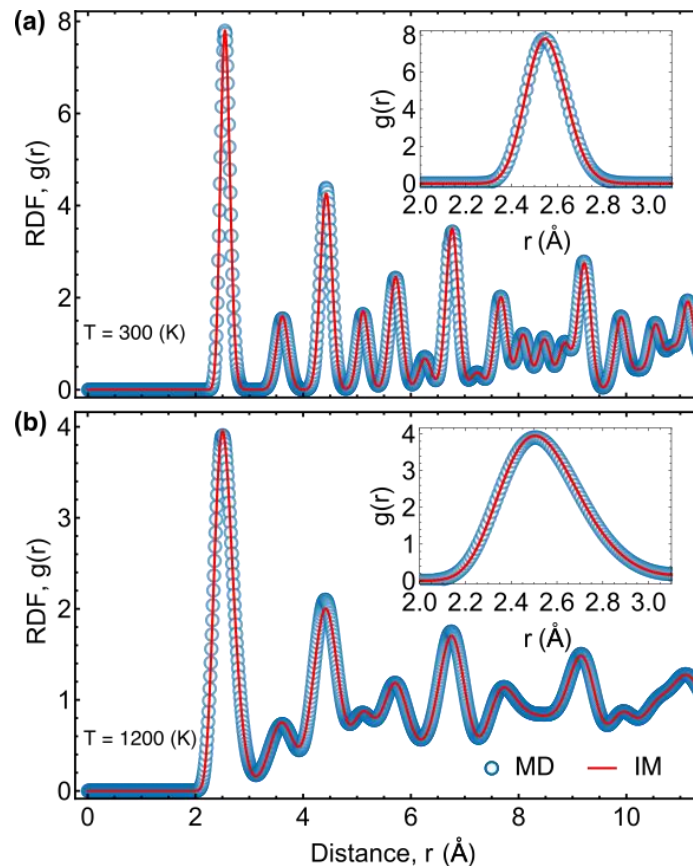


Рис. 1. Парная корреляционная функция для трехмерного ОЦК кристалла меди при двух температурах:  $T = 300$  (a) и  $T = 1200$  (b). Увеличенные первые корреляционные пики показаны на вставках. Красные линии отображают результаты, полученные с помощью интерполяционного метода, результаты МД показаны синими символами.

структуры парных корреляций классических кристаллов имеет решающее значение для точного анализа экспериментальных данных по рассеянию нейтронов и рентгеновских лучей, и при анализе протяжённой тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения (EXAFS) [1].

Настоящая работа направлена на исследование возможности описания парных корреляций в кристаллах с многочастичными взаимодействиями на основе интерполяционного метода кратчайших графов [2-4]. Для этой цели нами были рассмотрены кристаллы никеля и меди в приближении EAM взаимодействия [5]. Плотность кристаллов была взята при нормальных условиях. Моделирование выполнялось в пакете LAMMPS. Было выполнено построение функции радиального распределения (RDF) в большом диапазоне температур ниже линии плавления с помощью обобщенного метода кратчайших графов, учитывающего влияние многочастичности. На Рис. 1 представлен пример функции радиального распределения для

кристалла меди при температурах  $T = 300\text{K}$  (a) и  $T = 1200\text{K}$  (b), наблюдается точное совпадение данных моделирования и теоретических зависимостях как на ближних, так и на дальних корреляционных пиках. В результате анализа результатов, было показано, что существует простой подход, позволяющий восстановить функции радиального распределения кристалла в широком диапазоне температура, если известны среднеквадратичные смещения частиц при двух некоторых температурах.

Рис. 1. Парная корреляционная функция для трехмерного ОЦК кристалла меди при двух температурах:  $T = 300$  (a) и  $T = 1200$  (b). Увеличенные первые корреляционные пики показаны на вставках. Красные линии отображают результаты, полученные с помощью интерполяционного метода, результатами МД показаны синими символами.

Исследование выполнено при поддержке гранта МК-3446.2019.2, РФФИ №20-32-70186 и при инфраструктурной поддержке МГТУ им. Н. Э. Баумана.

#### Литература

1. A.V. Sapelkin and S.C. Bayliss, Phys. Rev. B **65**, 172104, **2002**
2. N.P. Kryuchkov, S.O. Yurchenko, Y.D. Fomin, E.N. Tsiok, and V.N. Ryzhov, Soft Matter, **14**, **2018**
3. S.O. Yurchenko, N.P. Kryuchkov and A.V. Ivlev, J. Phys.: Condens. Matter **28**, **2016**
4. E.V. Yakovlev, M. Chaudhuri, N.P. Kryuchkov, P.V. Ovcharov, A.V. Sapelkin and S.O. Yurchenko, J. Chem. Phys. **151**, 114502, **2019**
5. S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, Phys. Rev. B **33**, 7983, **1986**

## МЕЖСЛОЕВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В УГЛАХ ЯМАДЖИ В СЛОИСТЫХ МЕТАЛЛАХ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Могилюк Т. И.<sup>1</sup>, Григорьев П. Д.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный Исследовательский Центр

«Курчатовский Институт»

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау

5taras@mail.ru

Представлен квантово-механический расчет угловой зависимости межслоевой проводимости  $\sigma_{zz}(\theta)$  в наклонном магнитном поле в



квазидвухмерных слоистых металлах в углах Ямаджи в самосогласованном борновском приближении с помощью выражения из работы [1]. Для квадратичной и изотропной дисперсии электронов  $\varepsilon(k_x, k_y) = (k_x^2 + k_y^2) / (2m^*)$ , Кунихико Ямаджи получил [2], что минимумам межслоевой проводимости  $\sigma_{zz}(\theta)$  соответствуют нули  $J_0(k)$ , где  $J_0$  — функция Бесселя нулевого порядка,  $k \equiv k_F d \tan \theta$ ,  $k_F$  — импульс Ферми в плоскости,  $d$  — межслоевое расстояние и  $\theta$  — угол между приложенным магнитным полем  $\mathbf{B}$  и нормалью к проводящим плоскостям. Сведения об углах Ямаджи позволяют уточнить импульс Ферми. Согласно нашим расчётам, магнетопроводимость в углах Ямаджи, усреднённая по периоду магнитных квантовых осцилляций, обратно пропорциональна компоненте магнитного поля  $B_z$  в степени  $3/2$  в сильном магнитном поле, в котором расстояние между уровнями Ландау больше ширины уровней. Магнетопроводимость в максимумах магнитных квантовых осцилляций в таком поле обратно пропорциональна  $B_z$  в степени 1 и равна 0 в минимумах. В обоих случаях найденные выражения обратно пропорциональны номеру угла Ямаджи. Вкупе рассматривалось влияние на проводимость в углах Ямаджи «резервуарных» электронных состояний, не вносящих вклад в магнитные квантовые осцилляции межслоевой проводимости, создающих дополнительный канал проводимости.

Исследование выполнено при поддержке грантов РФФИ (№ 18-02-00280, 18-02-01022 А, 19-02-01000 А, 21-52-12027) .

#### Литература

1. P. D. Grigoriev, T. I. Mogilyuk, Phys. Rev. B **90**, 115138, **2014**
2. K. Yamaji, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 1520, **1989**

## УГЛЕВОДОРОДЫ ПОД ДАВЛЕНИЕМ: ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И НОВЫЕ СОЕДИНЕНИЯ

Наумова А. С.<sup>1,2</sup>, Лепёшкин С. В.<sup>1,2</sup>, Оганов А. Р.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Сколковский Институт Науки и Технологий, Инновационный Центр Сколково, 143026 ул. Нобеля 3, Москва, Россия

<sup>2</sup>Физический Институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991 Ленинский просп. 53, Москва, Россия

<sup>3</sup>Международный Центр Исследования Материалов, Северо-Западный Политехнический Университет, Сиань 710072, Китай  
naumova.nastasiya@gmail.com

Понимание поведения системы С-Н под высоким давлением необходимо из-за её важности в таких областях, как органическая, био- и нефтехимия, химия планет-гигантов, материалы для хранения водорода и др. В рамках этой работы мы провели систематическое исследование фазовой диаграммы зависимости системы С-Н в широком диапазоне давлений (до 400 ГПа) и температур (до 3000 К) с помощью эволюционного алгоритма предсказания структур USPEX и *ab initio* расчётов. Показано, что термодинамически стабильными являются только предельные углеводороды. Были предсказаны новые метан-водородные сокристаллы:  $2\text{CH}_4 * \text{H}_2$  (*I4/m* пространственная группа симметрии), ранее полученный экспериментально, стабильный при давлениях от 2 до 90 ГПа при 0 К, и два новых термодинамически стабильных соединения  $2\text{CH}_4 * 7\text{H}_2$  (*P-3m1* пространственная группа симметрии) и  $\text{CH}_4 * 9\text{H}_2$  (*Cm* пространственная группа симметрии), потенциально являющиеся перспективными материалами для хранения водорода. Показано, что *P2<sub>1</sub>/c* фаза метана стабильна при давлениях < 8 ГПа; *P-3m* и *Cmca* фазы кристаллического графана (СН) термодинамически стабильны при 7-18 и 18-50 ГПа и 0 К, соответственно; полиэтилен (СН<sub>2</sub>) имеет узкий диапазон стабильности. Также в рамках данной работы была построена *p-T-x* фазовая диаграмма системы С-Н и *p-T* фазовая диаграмма метана (СН<sub>4</sub>).

#### Литература

1. A. S. Naumova, S. Lepeshkin, A. R. Oganov. Hydrocarbons Under Pressure: Phase Diagrams and Surprising New Compounds in the C-H System. *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 20497-20501.

### **ВЛИЯНИЕ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ НА ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДОГО ВОДОРОДА**

Обжиров А. Е.<sup>1,2</sup>, Саитов И. М.<sup>1,2,3</sup>  
<sup>1</sup>ОИВТ РАН, <sup>2</sup>МФТИ (НИУ), <sup>3</sup>НИУ ВШЭ  
*obzhirov.ae@phystech.edu*

Поскольку водород является легчайшим элементом, его кристаллическая фаза обладает особыми динамическими свойствами. Предполагается, что благодаря этому металлический водород метастабилен и обладает высокой температурой перехода в

сверхпроводящее состояние, которая, возможно, близка к комнатной температуре. Экспериментальное изучение металлического водорода сталкивается с многочисленными трудностями, большинство сведений установлены в теоретических работах. Исследования металлического водорода продолжаются, и недавно были найдены новые фазы, стабильные при температуре 100 К [1].

Теория DFPT и метод конечных смещений являются наиболее распространенными методами расчета динамических свойств твердых тел. Они выведены в гармоническом приближении при нулевой температуре. Поскольку кристаллические структуры новых фаз металлического водорода стабильны при температуре 100 К, результаты расчетов, в которых учитываются ангармонические и температурные эффекты, могут значительно отличаться от результатов расчетов в гармоническом приближении при нулевой температуре. В данной работе рассмотрены способы учета этих эффектов и продемонстрирована важность соответствующих поправок для корректного описания динамических свойств новых фаз.

Сравниваются результаты двух серий расчетов динамических свойств. В первой серии расчетов силовые постоянные определяются в гармоническом приближении при температуре 0 К и давлении 515 ГПа методом конечных смещений. Силы Геллмана-Фейнмана рассчитываются в рамках теории функционала плотности в программном пакете VASP [2-5] и обрабатываются в программном пакете Phonopy [6]. Используются обменно-корреляционный функционал PBE и псевдопотенциал PAW Hard пакета VASP. При расчетах методом конечных смещений для сходимости динамических свойств необходима высокая точность расчета сил, которая достигается при разложении волновых функций в базисе плоских волн вплоть до энергии 1400 eV и при интегрировании на сетке  $76 \times 60 \times 76$  в первой зоне Бриллюэна. Заполненность электронных состояний вычисляется по схеме Methfessel-Paxton первого порядка при значении параметра уширения 0.1 eV.

Во второй серии при расчетах динамических свойств учитываются ангармонические и температурные эффекты. Соответствующие поправки выведены в модели [7], которая использует автокорреляционные функции скорости и силовые постоянные, полученные в гармоническом приближении. Автокорреляционные функции скорости рассчитываются при помощи молекулярной динамики. Молекулярная динамика осуществляется в

программном пакете VASP [2-5]. Для осуществления расчетов в рамках модели [7] применяется программный пакет DynaPhoPy [8].

Текущие расчеты показывают, что гармоническое приближение неправильно описывает динамические свойства новых фаз металлического водорода. Это объясняется тем, что новые фазы были обнаружены при помощи молекулярной динамики, в которой учитываются ангармонические и температурные эффекты. Данные поправки приводят к стабилизации кристаллических структур новых фаз. Таким образом, при исследованиях кристаллического водорода, стабильного при ненулевой температуре, необходимо выходить за рамки гармонического приближения.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 18-19-00734.

#### Литература

1. И.М. Сайтов, Письма в ЖЭТФ, **110**, 184, **2019**
2. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B, **47**, 558, **1993**
3. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B, **49**, 14251, **1994**
4. G. Kresse G., J. Furthmüller, Comput. Mat. Sci., **6**, 15, **1996**
5. G. Kresse G., J. Furthmüller, Phys. Rev. B, **54**, 11169, **1996**
6. A. Togo, I. Tanaka, Scr. Mater., **108**, 1, **2015**
7. D. B. Zhang, T. Sun, R. M. Wentzcovitch, Phys. Rev. Lett., **112**, 058501, **2014**
8. A. Carreras, A. Togo, I. Tanaka, Comput. Phys. Comm., **221**, 221, **2017**

## ПРЕДСКАЗАНИЕ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ СТЕКОЛ С ПОМОЩЬЮ НЕАФИННОГО ПОДХОДА

Палюлин В. В.

*Сколковский Институт Науки и Технологий, Москва, Россия*

*V.Palyulin@skoltech.ru*

Предсказание свойств по атомистической структуре является сложной, но важной в практическом отношении задачей. Для твердых тел возможность предсказания механических свойств (модулей упругости) по атомистическому строению могла бы позволить существенное ускорение разработки новых материалов с заданными свойствами. Для кристаллических тел теоретические подходы используют свойства симметрии, часть которых сохраняется при

аффинных деформациях [1]. В случае аморфных веществ (стекло) эти подходы не работают в силу отсутствия центральной симметрии, как в недеформированном состоянии, так и после приложения деформации. Некоторое время назад была предложена неаффинная теория [2], которая учитывает дополнительную релаксацию положений атомов в аморфных телах. Данная теория позволяет предсказать модули упругости на основе вычисления собственных значений и собственных векторов матрицы Гессеана.

В нашей работе мы применили данный подход для полимерных стекол и сравнили результаты с моделированием огрубленных моделей методами молекулярной динамики [3, 4, 5]. Полимерные стекла представляют несомненный теоретический интерес в виду наличия в них разных взаимодействий, включающий как центральные, так и нецентральные силы. Показано хорошее сходство предсказаний теории и моделирования модулей упругости при низких температурах. Для случая более высоких температур нами предложен способ учета температурного вклада через рассмотрение мгновенных состояний системы. Данный способ дает неплохие предсказания для огрубленных моделей в области средних и высоких частот вплоть до точки перехода в жидкое состояние. Также рассматривается влияние изгибной жесткости полимерных цепей, как на переход, так и на модули упругости [5].

Последняя часть работы обобщает теорию [2] на случай многокомпонентных веществ и показывает способы вычисления модулей упругости с помощью метода разложения по полиномам Чебышёва (англ. Kernel Polynomial Method, KPM). На огрубленных моделях проиллюстрировано хорошее качество предсказаний обобщения теории [2] и показано, как метод разложения по полиномам Чебышёва позволяет решить проблему расчета модулей упругости систем с размером 100000 частиц и более.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ 20-32-70001.

#### Литература

1. M. Born and H. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford University Press, Oxford, **1954**
2. A. Lemaitre and C. Maloney, *J. Stat. Phys.*, **123**, 415, **2006**
3. V.V. Palyulin, C. Ness, R. Milkus, R.M. Elder, T. Sirk, and A. Zaccone, *Soft Matter*, **14**, 8475, **2018**
4. R. Milkus, C. Ness, V.V. Palyulin, J. Weber, A. Lapkin, and A. Zaccone, *Macromolecules*, 2018, **51**, 1559, **2018**

5. C. Ness, V.V. Palyulin, R. Milkus, Elder R.M., T. Sirk, and A. Zaccane, Phys. Rev. E, **96**, 030501, **2017**

# МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ЖИДКОСТЕЙ ПРИ СТЕКЛОВАНИИ

Писарев В. В.  
НИУ ВШЭ  
*vpisarev@hse.ru*

Доклад посвящен особенностям, обнаруженным в макро- и микроскопическом поведении расплавов металлов при стекловании. Исследования методом молекулярной динамики (МД) показывают резкие изменения ряда свойств в одном и том же температурном интервале, что позволяет говорить о самосогласованном наборе критериев стеклования жидкости.

Поскольку экспериментальные исследования стеклования проводятся в основном при атмосферном давлении, МД моделирование проводилось для пленки со свободной границей, благодаря чему автоматически поддерживается околонулевое давление. Для изучения процесса стеклования пленка охлаждается с постоянной скоростью  $q = |dT/dt|$ .

Широко применяемый в экспериментальных исследованиях критерий стеклования - изменение удельной теплоемкости вещества. В атомистическом моделировании один из характерных признаков стекла - расщепление второго пика парной корреляционной функции (ПКФ). В работе [1] показано, что при быстром охлаждении расплава алюминия наблюдаются оба эффекта, также имеет место типично наблюдаемый в экспериментах гистерезис теплоемкости – при охлаждении и нагреве теплоемкости не совпадают. Продемонстрировано, что расщепление второго пика коррелирует с появлением икосаэдрических кластеров в расплаве. Однако оказывается, что температурный интервал, в котором происходит изменение ПКФ, находится выше, чем интервал изменения теплоемкости системы.

Для лучшего понимания, какой из температурных интервалов соответствует переходу в твердое состояние, исследовано поведение автокорреляционных функций (АКФ) сдвиговых напряжений, которые через соотношение Грина-Кубо определяют сдвиговую вязкость вещества. Изучение АКФ напряжений для ансамбля МД траекторий, полученных охлаждением жидкой пленки, позволило выявить следующие эффекты [2]:

- замедление релаксации сдвиговых напряжений при низкой

температуре, приводящее к расходимости интеграла Грина-Кубо, т.е. бесконечной вязкости;

- появление поперечных колебаний в пленке;
- нарушение эргодичности системы – разница в АКФ, усредненных вдоль одной траектории и по ансамблю траекторий.

Эти эффекты показывают проявление свойств твердого тела в аморфной системе и нарушение равновесности процесса. Они проявляются в том же температурном диапазоне, что и изменение теплоемкости. Таким образом, все указанные свойства являются самосогласованными критериями перехода жидкость-стекло, а популярный критерий стеклования в МД по расщеплению второго пика не является признаком стеклования, а наблюдается как в стекле, так и в метастабильной жидкости.

Другое свойство коллективного поведения частиц в стеклах обнаружено при исследовании 4-точечных корреляционных функций смещения [3]. Рассмотрены корреляции смещений  $CC(R)$  в парах частиц, находящихся на заданном расстоянии  $R$  друг от друга. В жидкости выше температуры плавления степень корреляции смещений монотонно падает в зависимости от расстояния между частицами в паре. В кристалле наблюдаются максимумы и минимумы в этих зависимостях, соответствующие различным координационным сферам. При переохлаждениях, соответствующих полученным в [1,2] интервалам стеклования, происходит качественный переход от типичной для жидкости монотонно спадающей  $CC(R)$  к немонотонной зависимости, характерной для кристалла. Таким образом, найден неизвестный ранее критерий стеклования, показывающий переход к твердому аморфному состоянию.

Зависимость  $T_g(q)$  возрастающая, что говорит о том, что переход не является фазовым, а представляет неравновесный структурный переход особого рода.

Доклад подготовлен в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов РФ "5-100".

#### Литература

1. Kolotova L.N., Norman G.E., Pisarev V.V., J. Non-Cryst. Solids, **429**, 98, **2015**
2. Kirova E.M., Norman G.E., Pisarev V.V., Comput. Mater. Sci., **172**, 109367, **2020**
3. Fleita D.Iu., Norman G.E., Pisarev V.V., J. Phys.: Condens. Matter, **32**, 214009, **2020**



# ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ПЛАНАРНЫХ СТРУКТУР СВЕРХПРОВОДНИК–ФЕРРОМАГНЕТИК СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Путилов А. В., Миронов С. В.

*Институт физики микроструктур РАН,  
ул. Академическая, д. 7, Нижний Новгород, 603087.  
alputilov@mail.ru*

В данной работе рассчитана величина критического тока планарной структуры, состоящей из сверхпроводящей (S) пленки конечной толщины  $d$ , покрытой слоем ферромагнитного (F) изолятора. Ранее было показано [1], что спин-орбитальное взаимодействие типа Рашбы на S/F границе приводит к возникновению спонтанного электрического тока  $J_{SO}$ , текущего вдоль границы, а также экранирующего сверхпроводящего мейсснеровского тока, текущего внутри сверхпроводника в слое с толщиной порядка лондоновской глубины проникновения магнитного поля  $\lambda$  вблизи S/F границы. Показано, что в случае  $d \ll \lambda$  величина критического тока анизотропна в плоскости структуры. Данный эффект обусловлен суперпозицией внешнего сверхпроводящего тока  $J_{ext}$  и мейсснеровского тока. Так, критический ток максимален, когда он частично компенсируется мейсснеровским током (то есть сонаправлен с поверхностным током) и минимален, когда направления внешнего и мейсснеровского токов совпадают.

Расчет критического тока производился в рамках теории Гинзбурга-Ландау. При этом учитывалось, что спин-орбитальное взаимодействие и вызываемый им спонтанный ток локализованы в слое атомной толщины  $l_{SO}$  вблизи S/F границы, так что соответствующий вклад в свободную энергию системы может быть представлен в виде поверхностного члена в функционале свободной энергии для сверхпроводника. При этом плотность свободной энергии имеет вид:

$$f = a|\psi|^2 + \gamma|\hat{D}\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 + \frac{(\text{rot}\mathbf{A})^2}{8\pi} + (\mathbf{p} \times \mathbf{h})(\psi * \varepsilon l_{SO} \delta(x) \hat{D}\psi + \text{э.с.}),$$

где  $a = -\alpha(T_c - T)$ ,  $b > 0$ ,  $\gamma > 0$  – стандартные параметры теории Гинзбурга-Ландау,  $\hat{D} = -i\eta\nabla + 2e\mathbf{A}/c$  – калибровочно-инвариантный

оператор импульса,  $\mathcal{A}$  - векторный потенциал магнитного поля,  $\psi_D$  - сверхпроводящий параметр порядка,  $\hat{n}$  - нормаль к S/F границе,  $h$  - обменное поле внутри ферромагнетика (предполагается направленным в плоскости F слоя),  $\varepsilon$  - параметр, характеризующий величину спин-орбитально взаимодействия,  $x$  - координата поперек слоев.

Поправка к критическому току изолированной сверхпроводящей пленки, обусловленная спин-орбитальным взаимодействием на S/F границе, определяется величиной безразмерного параметра  $s = \varepsilon l_{so} h \xi / (\sqrt{3} \gamma d)$ , где  $\xi = \sqrt{\gamma / |a|}$  - сверхпроводящая длина когерентности. Для пленки сверхпроводника II рода с толщиной  $d \ll \lambda$  величина критического тока в плоскости равна

$$J_c = J_0 (1 + s \cos \vartheta),$$

где  $J_0$  - величина критического тока изолированной сверхпроводящей пленки с толщиной  $d$ ,  $\vartheta$  - угол между направлением спонтанного тока, обусловленного спин-орбитальным взаимодействием и направлением внешнего тока.

Обнаруженная анизотропия критического тока представляет интерес, во-первых, как инструмент экспериментального детектирования поверхностного спонтанного тока (включая определение его направления). Кроме того, выбирая величину внешнего тока между минимальным и максимальным значением  $J_c$ , можно добиться диодного эффекта, при котором в одном направлении ток может протекать без диссипации, а для противоположного направления тока сопротивление пленки оказывается конечным. Данный эффект может быть использован в устройствах сверхпроводящей спинтроники.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 18-72-10027).

#### Литература

1. S. Mironov, A. Buzdin, Phys. Rev. Lett. **118**, 077001, 2017

# ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НИТРИДОВ ЖЕЛЕЗА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Сагатов Н. Е.<sup>1</sup>, Сагатова Д. Н.<sup>1</sup>, Гаврюшкин П. Н.<sup>1</sup>, Литасов К. Д.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН

<sup>2</sup>Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН  
sagatovnye@igm.nsc.ru

В связи с важностью для материаловедения, промежуточные соединения в системе Fe-N детально изучены при атмосферном давлении. Однако имеется лишь несколько работ по исследованию этих соединений в области высоких давлений [1, 2]. В данном исследовании были проведены предсказания промежуточных составов и структур нитридов железа на основе теории функционала плотности в интервале давлений 100–400 ГПа.

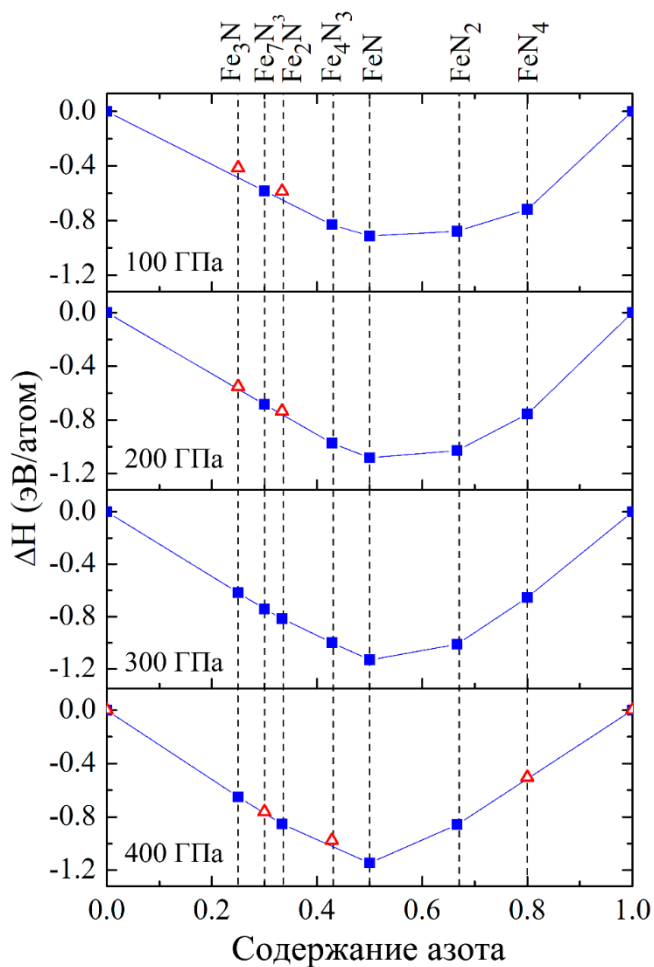


Рис. 1. Энтальпии образования соединений в системе Fe-N в интервале давлений 100–400 ГПа.

Новые стабильные структуры нитридов  $Fe_2N$ -*Pnma* и  $Fe_3N$ -*C2/m* были найдены при давлении выше 300 ГПа (рис.1). Структурный анализ показал, что два этих нитрида изоструктурны высокобарическим модификациям карбидов железа  $Fe_2C$ -*Pnma*-I (структурный тип C23) и  $Fe_3C$ -*C2/m* (ранее предсказанная нами). Также, в рассматриваемом интервале давлений, мы предсказали нитрид  $Fe_4N_3$ , который является стабильным до 306 ГПа и выше указанного давления распадается на смесь  $Fe_2N+FeN$ . В случае  $Fe_7N_3$ , проведенные расчеты по поиску структур не выявили фазу стабильную относительно распада на изохимическую смесь. На основе изоструктурности карбидов и нитридов нами была смоделирована структура  $Fe_7N_3$ -*Pbca* (аналог экспериментальной о-фазы  $Fe_7C_3$  [3]) и установлена ее стабильность относительно предыдущих предсказанных фаз  $Fe_7N_3$ -*Amm2*, *-Cmc2<sub>1</sub>*, и *-C2/m* [4], а также относительно распада на изохимическую смесь. Данный результат находится в хорошем соответствии с имеющимися экспериментальными данными в ограниченном интервале давлений [5].

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 19-35-90043.

#### Литература

1. F. Kaminsky, R. Wirth, *Am. Mineral.*, **102**, 1667, **2017**
2. D. A. Zedgenizov, K. D. Litasov, *Am. Mineral.*, **102**, 1769, **2017**
3. C. Prescher et al., *Nat. Geosci.*, **8**, 230, **2015**
4. N. Sagatov et al., *RSC Adv.*, **9**, 3577, **2019**
5. S. Minobe et al., *Geophys. Res. Lett.*, **42**, 5206, **2015**

### ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ФАЗОВЫХ СООТНОШЕНИЙ В СИСТЕМЕ ОКСИД-КАРБОНАТ ЩЕЛОЧНО-ЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Сагатова Д. Н.<sup>1,2</sup>, Гаврюшкин П. Н.<sup>1,2</sup>, Сагатов Н. Е.<sup>2</sup>,  
Шацкий А. Ф.<sup>1,2</sup>, ЛITASOV К. Д.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Новосибирский государственный университет

<sup>2</sup>Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева СО РАН

<sup>3</sup>Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН  
*d.sagatova1729@gmail.com*

В рамках теории функционала плотности с помощью алгоритмов предсказания структур, реализованных в программных пакетах

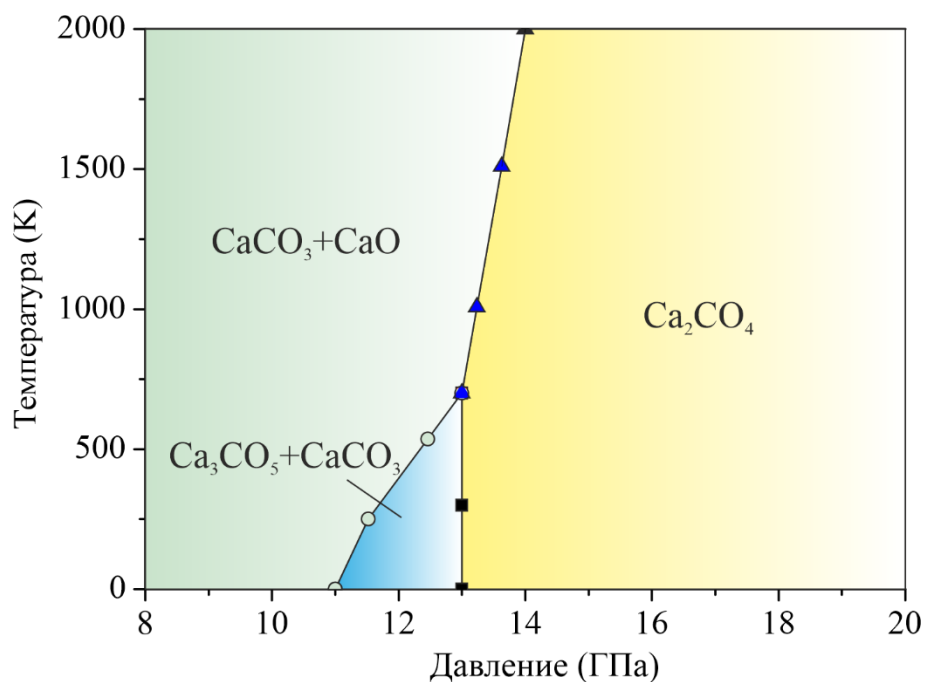


Рис.1. Фазовая *PT*-диаграмма Ca<sub>2</sub>CO<sub>4</sub>.

USPEX и AIRSS [1,2], была изучена термодинамическая стабильность составов с промежуточной стехиометрией системы MO-MCO<sub>3</sub> (M= Mg, Ca). В первую очередь мы оценили энергию образования ортокарбонатов в их традиционной стехиометрии M<sub>2</sub>CO<sub>4</sub>. Расчёты фазовых *PT*-диаграмм выполнены в квазигармоническом приближении с помощью методов решеточной динамики.

В системе CaO-CaCO<sub>3</sub> были выявлены два стабильных соединения: новая структура ортокарбоната кальция Ca<sub>2</sub>CO<sub>4</sub>-*Pnma* [3] и предсказанная ранее Ca<sub>3</sub>CO<sub>5</sub>-*Стст* [4]. В системе MgO-MgCO<sub>3</sub> все предсказанные составы оказались невыгодными относительно разложения на оксид и карбонат магния.

Кристаллические структуры Ca<sub>2</sub>CO<sub>4</sub>-*Pnma*, Ca<sub>3</sub>CO<sub>5</sub>-*Стст*, а также метастабильная структура ортокарбоната магния Mg<sub>2</sub>CO<sub>4</sub>-*Pnma* содержат углерод в тетраэдрической координации, который образует изолированные группы CO<sub>4</sub>-тетраэдров. Все вышеуказанные соединения имеют структурные аналоги среди силикатов. Так, ортокарбонат Ca<sub>2</sub>CO<sub>4</sub>-*Pnma* изоструктурен α'-<sub>H</sub>-Ca<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>, Ca<sub>3</sub>CO<sub>5</sub>-*Стст* – Ba<sub>3</sub>SiO<sub>5</sub>, а Mg<sub>2</sub>CO<sub>4</sub>-*Pnma* – Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>.

Рассчитанная фазовая *PT*-диаграмма свидетельствует, что Ca<sub>2</sub>CO<sub>4</sub>-*Pnma* стабилизируется, начиная с давления 13 ГПа, и сохраняет свою устойчивость во всем рассмотренном интервале температур (Рис.1). Ca<sub>3</sub>CO<sub>5</sub>-*Стст* стабилизируется относительно

смеси  $\text{CaCO}_3+2\text{CaO}$  при давлении 11 ГПа. Однако при нагреве до температуры 1000 К он разлагается на смесь  $\text{Ca}_2\text{CO}_4+\text{CaO}$ . Кроме этого, мы определили, что фаза  $\text{Mg}_2\text{CO}_4$ -*Pnma* стабилизируется при высоких температурах, достигающих ~2000 К при давлении 50 ГПа. Для детального изучения поля стабильности  $\text{Mg}_2\text{CO}_4$ -*Pnma* необходимо определить температуру плавления. Это является целью наших будущих исследований.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-03-00774.

#### Литература

1. A. R. Oganov, C. W. Glass, J. Chem. Phys., **124**, 244704, **2006**
2. C. J. Pickard, R. Needs, Phys. Rev. Lett., **97**, 045504, **2006**
3. D. Sagatova et al., Lithos, **370-371**, 105637, **2020**
4. X. Yao et al., Phys. Rev. B, **98**, 014108, **2018**

## ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ И МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Саитов И. М.

*НИУ «Высшая школа экономики»*

*isaitov@hse.ru*

Проблема металлизации кристаллического молекулярного водорода при повышении давления теоретически исследуется с 1935 года; предполагалось, что молекулы водорода диссоциируют, образуя объёмно-центрированную кубическую кристаллическую решетку с одним протоном в элементарной ячейке [1]. В русле этого предположения продолжены первопринципные теоретические подходы, основанные на теории функционала плотности (ТФП) и квантовом методе Монте-Карло, которые предсказывают возможность существования стабильной атомарной структуры кристаллического водорода в диапазоне давлений от 370 до 500 ГПа. Было показано также, что вплоть до атмосферного давления атомарный металлический водород может существовать в метастабильном состоянии [2, 3]. Экспериментальные указания на

образование кристаллического металлического водорода предположительно были зафиксированы в работах [4, 5] при давлениях 495 и 425 ГПа, соответственно.

Вместе с тем было обнаружено, что относительно высокие проводимости могут наблюдаться и в кристаллическом молекулярном водороде. Появился даже термин металлический молекулярный водород. Структура водорода при давлениях выше 200 ГПа является моноклинной с симметрией  $C2/c$  с 12-ю атомами в элементарной ячейке. Полученные значения удельного сопротивления кристаллического молекулярного водорода являются типичными для полуметаллов, в частности, для висмута. Это наталкивает на мысль, что молекулярные кристаллы водорода являются полуметаллами в указанных выше условиях. Рассматриваются структуры кристаллического молекулярного водорода, полученные в работе [6] при сжатии вдоль изотермы 100 К: моноклинная структура с симметрией  $C2/c$  и ромбическая структура с симметрией  $Cmca-4$ . Наблюдается перекрытие зоны проводимости и валентной зоны на уровне Ферми, причем валентная зона оказывается частично незаполненной при частично заполненной зоне проводимости. Найденные зонные структуры и электропроводность позволяют отнести их к полуметаллам. Рассмотрен диапазон давлений  $P = 302$ – $626$  ГПа. Приведены результаты расчёта зависимости электропроводности от давления для структуры  $C2/c$ .

Получены полуметаллические состояния кристаллического молекулярного водорода при температуре 100 К в диапазоне давлений от 361 до 626 ГПа. Для анализа характера проводимости проводится расчет зонной структуры в рамках теории функционала плотности с использованием гибридного обменно-корреляционного функционала HSE [7]. Одно из полуметаллических состояний возникает в моноклинной структуре с симметрией  $C2/c$  при сжатии до давления 361 ГПа, при котором происходит закрытие щели между валентной зоной и зоной проводимости. Причем валентная зона является частично незаполненной, а зона проводимости - частично заполненной, что является характерным признаком полуметалла. В диапазоне давлений 302–361 ГПа кристаллический молекулярный водород со структурой  $C2/c$  остается изолятором. Рассчитана зависимость электропроводности от давления для 302 – 545 ГПа. Второе полуметаллическое состояние наблюдается для ромбической структуры с симметрией  $Cmca-4$  в диапазоне давлений 545 – 626 ГПа.

Обнаружен гистерезис зависимости давления от плотности при сжатии и растяжении в диапазоне давлений от 350 ГПа до 625 ГПа, соответствующий области существования метастабильных состояний молекулярного и немолекулярного твердого водорода. Получена оценка равновесного давления перехода в немолекулярное состояние 487.5 ГПа.

Доклад подготовлен в ходе работы в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации «5-100».

#### Литература

1. E. Wigner, H. B. Huntington, J. Chem. Phys., **3**, 764, **1935**
2. N.W. Ashcroft, Phys. Rev. Lett., **21**, 1748, **1968**
3. Е.Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, ЖЭТФ, **62**, 1492, **1972**
4. R. Dias, I. F. Silvera, Science, **355**, 718, **2017**
5. P. Loubeyre, F. Occelli, P. Dumas, Nature, **577**, 631, **2020**
6. И. М. Саитов, Письма в ЖЭТФ, **110**, 184, **2019**
7. J. Heyd, G. E. Scuseria, M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. **118**, 8207 **2003**

## **АВТОМАТИЗАЦИЯ УЧЕТА ПУБЛИКАЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ: ОБЗОР ВОЗМОЖНОСТЕЙ НАУЧНЫХ БАЗ ДААННЫХ И СЕРВИСОВ**

Самарин А. Н.

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН  
sasha@lt.gpi.ru*

В последнее десятилетие в сфере науки в Российской Федерации наблюдается устойчивая тенденция к увеличению количества разнообразных отчетов (появляются новые отчеты и изменяются форма и содержание у старых), сокращению сроков их подготовки (вплоть до нескольких дней) и усилению санкций за несвоевременное предоставление отчетов. В таких условиях научные организации с трудом могут вести традиционный учет публикаций в виде нескольких текстовых или табличных документов, поэтому требуется вводить автоматизацию такого учета.



Существует три подхода к автоматизации учета публикаций:

1. Ввод и учет публикаций происходит в единой системе, предоставляемой контролирующей организацией (например, министерством). При грамотной реализации такой системы это является идеальным вариантом, т. к. научным организациям не требуется прикладывать дополнительных усилий для построения отчетов: все данные уже есть в системе и проверяющие имеют необходимые отчеты и статистику в любое удобное им время. К сожалению, на текущий момент подобной системы не существует.

2. Учет публикаций происходит в специальных профилях научных баз данных. Обычно этот вариант ограничивает множество публикаций только конкретной научной базой данных и не позволяет формировать требуемую регулятором отчетность.

3. Учет публикаций происходит в собственных базах данных научной организации.

При создании подобной базы данных организация сталкивается с необходимостью ее заполнения: как разового (импорт всех существующих публикаций на дату ввода базы в эксплуатацию), так и периодического (пополнение базы данных по мере выхода новых публикаций). Регулярное наполнение можно организовать целиком силами сотрудников, однако при этом существенным становится человеческий фактор: при вводе данных всегда существует вероятность ошибки и сотрудники, заполняющие данные, должны иметь должную мотивацию для качественного выполнения этой рутинной работы. В связи с этим для относительно крупных научных организаций актуален вопрос осуществления интеграции с одной или несколькими существующими научными базами данных для того, чтобы в большей или меньшей степени автоматически получать сведения о вышедших публикациях и оставить сотрудникам только функцию контроля за происходящим процессом.

В настоящей работе приведен обзор и сравнение возможностей баз данных Web of Science, Scopus и CrossRef по предоставлению данных в автоматизированном режиме и показаны основные подводные камни, которые следует учитывать при их использовании.

Работа выполнялась при частичной поддержке гранта РФФИ №18-02-01152.

# СПОНТАННЫЕ ТОКИ В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ КОЛЬЦЕ СО СПИРАЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ ТЕКСТУРОЙ

Самохвалов А. В.<sup>1</sup>, Robinson J. W. A.<sup>2</sup>, Буздин А. И.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики микроструктур РАН, г. Нижний Новгород

<sup>2</sup>University of Cambridge, United Kingdom.

<sup>3</sup>University Bordeaux, France.

samokh@ipmras.ru

Сверхпроводимость в материалах с сильной спин-орбитальной связью и магнитным обменным или зеемановским полем может приводить к возникновению ряда нетривиальных физических эффектов, исследование которых представляет интерес как с точки зрения фундаментальной науки (поиск майорановских фермионов и топологической сверхпроводимости [1]), так и из-за потенциальной применимости подобных гибридных структур в интересах сверхпроводниковой спинтроники [2]. Так, из-за отсутствия инверсной симметрии на границе обычного сверхпроводника (SC) с синглетным спариванием s-типа и ферромагнитного изолятора (FI), спин-орбитальное взаимодействие (SO) Рашбы  $[\mathcal{E} \times \hat{p}]\hat{h}$  ( $\mathcal{E}$  - вектор матриц Паули,  $\hat{h}$  - единичный вектор по нормали к границе) в сочетании с магнитным обменным полем  $\hat{h}$  приводят к образованию сверхпроводящего состояния со спиральной (геликоидальной) фазовой модуляцией [3], для которого характерно наличие куперов-

ских пар с ненулевым суммарным импульсом  $\hat{q}$  в основном состоянии, подобно фазе Ларкина–Овчинникова–Фульде–Феррелла.

В докладе представлены результаты анализа неоднородного сверхпроводящего состояния со спиральной фазовой модуляцией, возникающего в тонком сверхпроводящем кольце, часть которого взаимодействует с FI пластиной с обменным полем  $\hat{h}$  (Рис.1). В рамках феноменологической теории Гинзбурга–Ландау влияние SO взаимодействия и обменного поля описывается в функцио-

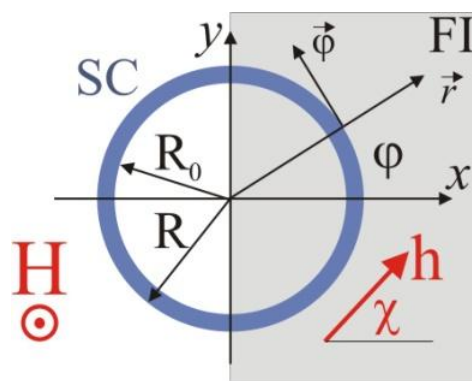


Рис.1. Тонкое сверхпроводящее кольцо (SC) на поверхности ферромагнитного изолятора (FI), занимающего область  $x \geq 0$ .

нале слагаемым, которое пропорционально градиенту сверхпроводящего параметра порядка  $\psi$  и имеет вид  $[\hbar \times \hbar](\nabla \psi)\psi^*$  [4]. Показано, что участок кольца, где присутствуют сильное спин-орбитальное взаимодействие и обменное поле, играет роль сверхпроводящей «фазовой батареи», что вызывают заметное смещение осцилляций Литтла-Паркса  $T_c(H)$  (Рис.2). Направление и величина смещения  $\Delta\phi$  зависят от ориентации обменного поля. При отсутствии внешнего магнитного поля  $H$  в кольце возникает спонтанный сверхток, амплитуда которого осциллирует и меняет знак при изменении константы  $\lambda_{SO}$ , зависящей как от величины и направления обменного поля, так и силы спин-орбитального взаимодействия (Рис.3).

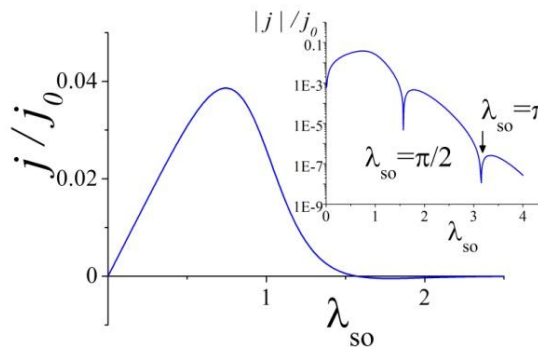
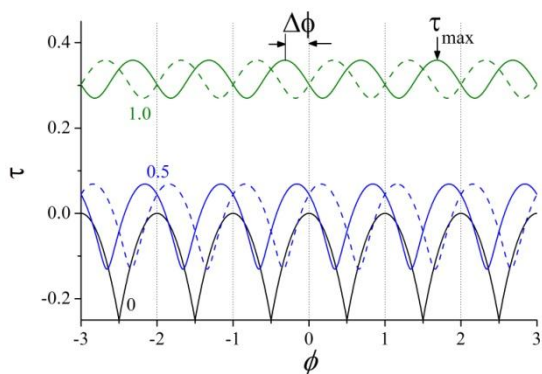


Рис.2. Осцилляции Литтла-Паркса для нескольких значений параметра  $\lambda_{SO}$  (цифра рядом с кривой). Рис.3. Зависимость плотности спонтанного тока от параметра  $\lambda_{SO}$ .

Работа выполнялась при поддержке РФФИ (грант №18-02-00390) и РНФ (грант № 20-12-00053).

#### Литература

1. J. Alicea, Rep. Prog. Phys., **75**, 076501, **2012**; C.W.J. Beenakker, Annu. Rev. Con. Mat. Phys. **4**, 113, **2013**
2. M. Eschrig, Rep. Prog. Phys. **78**, 104501, **2015**
3. V. Barzykin, L. P. Gor'kov, Phys. Rev. Lett., **89**, 227002, **2002**; O. Dimitrova, M.V. Feigel'man, Phys. Rev. B **76**, 014522, **2007**
4. V. P. Mineev, M. Sigrist, in Lecture notes in Physics **847**, 129, **2012**; V. M. Edelstein, J. Phys. Condens. Matter **8**, 339, **1996**

## ВЯЗКОСТЬ ОБЪЕМНО-АМОРФИЗУЮЩИХСЯ 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>, Ладьянов В. И.<sup>1</sup>, Щелкачев Н. М.<sup>2</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*

Сплавы на основе системы Fe-B-Si легированные тугоплавкими элементами, такими как Ta, Nb, Zr, представляют перспективную группу объемных аморфных сплавов, которые проявляют высокие магнитомягкие и механические свойства. Повышение стеклообразующей способности этих сплавов является актуальной задачей. Перспективным способом повышения аморфизирующей способности сплавов является увеличение конкуренции при зародышеобразовании кристаллических фаз, в частности фаз со сложной кристаллической структурой – фаз-стеклообразователей. Подбирая тип примеси и их количество можно добиться существования в аморфизирующей системе сразу нескольких фаз стеклообразователей, конкуренция между которыми приведет к повышению аморфизирующей способности.

Как правило, наибольшая аморфизирующая способность расплава наблюдается при его закалке из определенного температурно-концентрационного интервала. При этом для выбора наилучших параметров объемной аморфизации расплавов можно использовать анализ их физико-химических свойств. Важнейшим физико-химическим свойством металлических расплавов является вязкость, которая чувствительна к структурным изменениям в системе и выступает в качестве одного из основных технологических параметров металлургического процесса.

Проведенные ранее исследования кинематической вязкости расплавов систем (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.1</sub>)<sub>100-x</sub>Ta<sub>x</sub> и (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.1</sub>)<sub>100-x</sub>Ta<sub>x</sub> (x=0-4) показали, что на концентрационных зависимостях вязкости обнаружены максимумы вблизи 1ат.% Ta и 3ат.% Nb, соответственно, которые свидетельствуют об изменении ближнего упорядочения в жидкой фазе. На основании этих результатов были получены сплавы легированные и

Ta и Nb с общей концентрацией легирующих элементов 1 и 3 ат.% -  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{99}\text{Ta}_{0,5}\text{Nb}_{0,5}$  и  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{97}\text{Ta}_{0,75}\text{Nb}_{2,25}$ .

Кинематическую вязкость ( $\nu$ ) измеряли методом затухающих крутильных колебаний цилиндрического тигля с расплавом в варианте Швидковского Е.Г на автоматизированной установке. Все измерения проводили в корундовых тиглях в защитной атмосфере очищенного гелия с двумя торцевыми поверхностями в режимах ступенчатого нагрева от  $T_{\text{пл}}$  до  $1680^{\circ}\text{C}$  и последующего охлаждения с шагом  $30^{\circ}\text{C}$  после изотермической выдержки на каждой температуре в течение 5 минут. Измерение температурных зависимостей вязкости проводили с учетом седиментационных процессов, характерных для этих систем. Относительная ошибка измерения вязкости составляла - 3,5%. Для анализа структуры расплавов использовали метод *ab initio* молекулярной динамики.

Полученные равновесные температурные зависимости вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{99}\text{Ta}_{0,5}\text{Nb}_{0,5}$  и  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{97}\text{Ta}_{0,75}\text{Nb}_{2,25}$  в режимах нагрева и последующего охлаждения совпадают и характеризуются монотонными зависимостями Аррениусовского типа. При этом замещение Ta в сплаве  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})_{99}\text{Ta}_1$  атомами Nb не приводит к повышению значений вязкости и энергии активации, не смотря на то, что Nb даже при небольших концентрациях повышает вязкость расплава основы. В то же время замещение Nb небольшим количеством Ta приводит к уменьшению значений вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})\text{-Nb}$ , энергия активация вязкого течения при этом не изменяется. Наблюдаемые эффекты изменения вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0,75}\text{V}_{0,15}\text{Si}_{0,1})\text{-(Ta,Nb)}$  при легировании как Ta, так и Nb обусловлены особенностями парного взаимодействия вокруг атомов Ta и Nb.

Работа выполнена по теме НИР (№ АААА–А16–116021010084-2). Анализ атомного ближнего упорядочения в расплавах проводили при поддержке гранта РФФ №18-12-00438.

# СИММЕТРИЙНЫЙ АНАЛИЗ ЭВОЛЮЦИИ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ И МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В Fe-ЛАНГАСИТАХ

Тихановский А. Ю.<sup>1,2</sup>, Мухин А. А.<sup>1</sup>, Иванов В. Ю.<sup>1</sup>, Кузьменко А. М.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Федеральный исследовательский центр Институт общей физики им.  
А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный  
исследовательский институт), Долгопрудный, Россия  
*tikhanovskii@phystech.edu*

Недавно был обнаружен интересный класс соединений, проявляющих магнитоэлектрические свойства - железосодержащие соединения со структурой лангасита, такие как  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ ,  $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  и  $\text{Sr}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ . Кристаллическая структура Fe лангаситов относится к пространственной группе R321 и является нецентросимметричной. При температурах ниже точки Нееля ( $T_N \sim 27\text{K}$ ) они упорядочиваются антиферромагнитно в структуру с двойной киральностью (внутриплоскостное треугольное упорядочение спинов  $\text{Fe}^{3+}$ , вращающихся вдоль оси c) [1]. Симметрия кристаллов допускает существование магнитоэлектрического эффекта, однако проведенные ранее исследования электрической поляризации оказались противоречивыми [2]-[4], кроме того, остаются неясны механизмы возникновения магнитоэлектрического эффекта в соединениях. В работе выполнен феноменологический анализ магнитных и магнитоэлектрических свойств Fe-лангаситов и предложено упрощенное описание поведения сложной спиновой структуры в магнитном поле, отражающее ее основные черты.

С использованием сервиса Bilbao Crystallographic Server [5] построены базисные функции магнитного представления пространственной группы R321 и произведена параметризация магнитной спиральной структуры в предположении преобладающего обменного взаимодействия по сравнению с анизотропными и зеемановскими взаимодействиями. В результате предложено «сокращенное» описание спиральной магнитной структуры, в рамках которого она характеризуется направлением нормали к плоскости вращения спинов  $\vec{n}(\omega, \varphi)$ , где  $\omega$  – угол между нормалью и осью c,  $\varphi$  – угол между проекцией нормали на базисную плоскость и осью a.

В общем случае при наличии магнитного поля  $\mathbf{H}$  система характеризуется двумя параметрами порядка, один из которых относится к спиральной магнитной структуре с группой волнового вектора  $\mathbf{k}_0=(0,0,1/7)$ , а второй к индуцированной однородной магнитной структуре с  $k=0$ . Термодинамический потенциал определяется суперпозицией вкладов обоих типов параметров порядка и при  $T < T_N$  представляется в виде:

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2}A \vec{M}^2 + \frac{1}{2}K(\sin \omega)^2 - \vec{M}\vec{H} + \frac{1}{4}D \sum_{i=1}^3 (\vec{Q}_i(\omega, \varphi) * \vec{M})^2$$

где  $A$  – константа изотропного обменного взаимодействия,  $K$  – эффективная константа анизотропии, стабилизирующая спираль в базисной плоскости,  $M$  – намагниченность,  $\vec{Q}_i(\omega, \varphi)$  комбинации базисных функций магнитного представления в позициях  $i=1,2,3$ . Минимизацией термодинамического потенциала по  $\mathbf{M}$  и  $\vec{n}(\omega, \varphi)$  позволила описать эволюцию магнитной структуры в поле, выявить, в частности, анизотропию магнитной восприимчивости в базисной плоскости и перпендикулярно ей, а также установить характер переориентации спиновой спирали в зависимости от ориентации магнитного поля.

Анализ магнитоэлектрического термодинамического потенциала треугольной спиральной магнитной структуры позволил установить связь электрической поляризации с ориентацией спирали, определяемой углами  $\omega$  и  $\varphi$ :

$$P_a = \alpha_1 \sin \varphi (1 - \cos \omega) \sin \omega + \alpha_2 \sin \varphi (1 + \cos \omega) \sin \omega,$$

$$P_{b*} = \alpha_1 \cos \varphi (1 - \cos \omega) \sin \omega + \alpha_2 \cos \varphi (1 + \cos \omega) \sin \omega.$$

Для возникновения поляризации в системе необходимо понижение симметрии. Понижение симметрии происходит при выходе плоскости магнитной спирали из базисной плоскости ( $ab$ ), что проявляется в возникновении электрической поляризации в плоскости ( $ab$ ) и качественно согласуется с экспериментом.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 16-12-10531).

#### Литература

1. K. Marty, Phys. Rev. Lett., **101**, 247201, **2008**
2. H.D. Zhou, Chem. Mater, **21**, 156-159, **2009**
3. N. Lee, Appl. Phys. Lett, **104**, 072904, **2014**
4. H. Narita, Phys. Rev. B, **94**, 094433, **2016**
5. M. I. Aroyo. Acta Cryst., **A62**, 115-128, **2006**

# ТЕРМИЧЕСКИ СТАБИЛЬНЫЙ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЙ СПЛАВ ScTiZrHf С ГПУ СТРУКТУРОЙ

Упоров С. А.<sup>1,2</sup>, Эстемирова С. Х.<sup>1,2</sup>, Быков В. А.<sup>1,2</sup>, Рыльцев Р. Е.<sup>1,2</sup>,  
Стерхов Е. В.<sup>1</sup>, Замятин Д. А.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Институт Металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет, г. Екатеринбург

<sup>2</sup>Институт геологии и геохимии УрО РАН, г. Екатеринбург

segga@bk.ru

Большинство известных высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) представляют собой ОЦК или ГЦК твердые растворы. Формирование низкосимметричных стабильных фаз в таких многокомпонентных системах наблюдается довольно редко. Исключение составляют лишь редкоземельные сплавы, где из-за химического и структурного сродства элементов легко образуются ГПУ твердые растворы. Особый интерес представляют системы, включающие в состав разнородные металлы, обладающие гексагональной и кубической фазами. Конечная кристаллическая структура в таких системах обычно сильно зависит от способа синтеза и термической обработки.

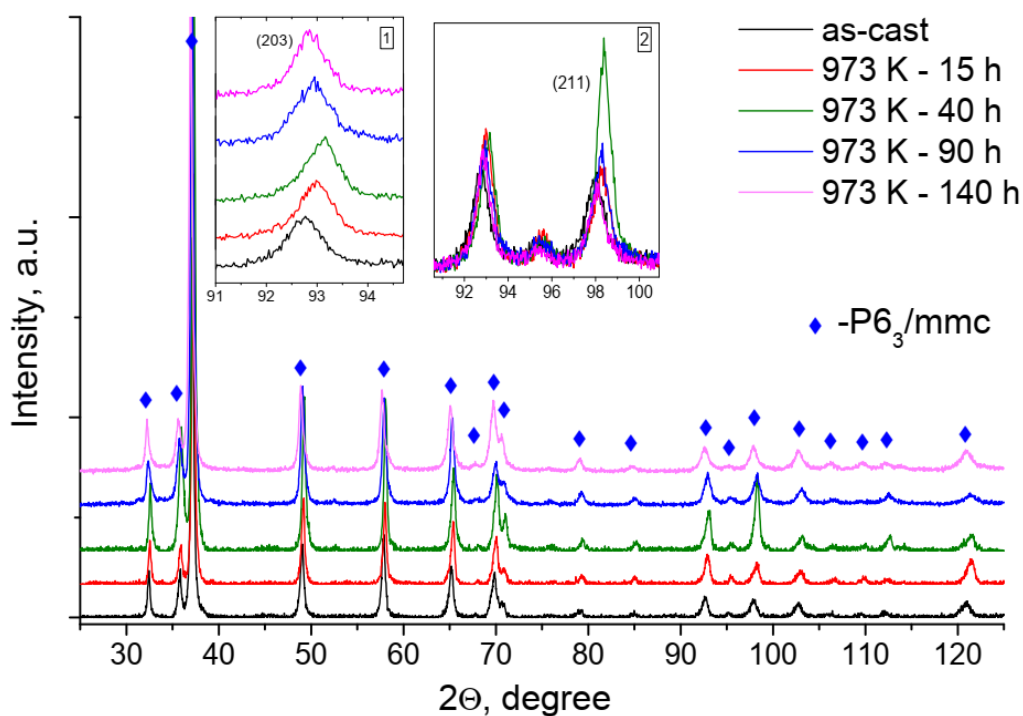


Рис. 1. Дифракционные картины для литого сплава (as-cast) и образцов, отожженных при 973 К в течение 15-140 часов.



В данной работе мы проводим комплексный анализ нового однофазного ВЭС  $\text{ScTiZrHf}$ . Сплав получен путем электродугового сплавления чистых металлов, взятых в равном соотношении. Для проверки структурную стабильность полученного материала, проводился отжиг при 973 К в течение 15-140 часов. Дифракционный анализ показал, что сплав обладает термически стабильной однофазной кристаллической структурой (рис. 1). Электронная микроскопия образцов подтверждает фазовую и химическую однородность полученного материала.

С целью охарактеризовать новый материал, мы изучили его электрон-транспортные и магнитные свойства в широком диапазоне температур. Сплав демонстрирует чисто металлический характер электрической проводимости. Теплопроводность материала на 50% определяется фононным вкладом.

Магнитные измерения выявили парамагнитную природу нового ВЭС; из полученных экспериментальных результатов оценена электронная плотность состояний (DOS) на уровне Ферми,  $1 \text{ эВ}^{-1}$ . На основании полученных результатов сделано предположение о чисто металлическом характере межатомного взаимодействия в системе  $\text{ScTiZrHf}$ . Для проверки высказанной гипотезы, было выполнено *ab-initio* молекулярно-динамическое моделирование жидкой фазы. Полученные данные однозначно указывают на отсутствие сильного химического взаимодействия между компонентами сплава и почти аддитивный характер жидкой смеси, что подтверждает результаты, полученные экспериментально.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 19-73-20053).

## **ОПИСАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЖИДКОСТИ ЮКАВЫ НА ОСНОВЕ АНАЛИТИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ РАДИАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ**

Файрушин И. И.<sup>1,2</sup>, Мокшин А. В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Казанский (Приволжский) федеральный университет*

<sup>2</sup>*Объединенный институт высоких температур РАН*

*fairushin\_ilnaz@mail.ru*

Построено аналитическое приближение для радиальной функции распределения (РФР) частиц однокомпонентной Юкава-жидкости, которое определяется характерными параметрами этой системы:

параметрами неидеальности и структуры [1]. Данное приближение позволяет рассчитать многие физические свойства на основе соответствующих микроскопических выражений. В частности, в работе приводятся результаты расчета таких термодинамических величин как полная внутренняя энергия, внутреннее давление, избыточная энтропия и дисперсионные зависимости продольных акустико-подобных коллективных возбуждений. Сопоставление полученных теоретических результатов с результатами для истинной радиальной функции распределения обнаруживает согласие.

Исследование выполнено при поддержке грантов РФФ (№ 19-12-00022) и РФФИ 18-02-00407.

Литература

1. В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, С. А. Храпак, В. И. Молотков, О. Ф. Петров, УФН, **174**, 495, **2004**

## **НЕАДИАБАТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ И ЭКСИТОНО-ПОДОБНЫЕ СОСТОЯНИЯ ПРИ НАГРЕВЕ ПЛОТНОГО ФЛЮИДА ВОДОРОДА**

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*

Переход изолятор-проводник в плотном флюиде водорода является одной из нерешенных задач последнего десятилетия. За последние годы было проведено большое количество экспериментов, направленных на определения характера и условий предполагаемого перехода, однако до сих пор остается большое число разногласий в данных различных исследовательских групп.

Помимо экспериментальных наблюдений данного перехода, существует большое количество работ теоретического характера. Причем большая плотность вещества, отсутствие упорядоченной структуры и близость энергетических уровней накладывают особые требования на используемые теоретические модели.

Одним из наиболее используемых методов в работах, посвященных исследованию рассматриваемого перехода, является метод адиабатической Борн-Оппенгеймеровской динамики с теорией функционала плотности в формулировке конечных температур. Однако этот метод предполагает наличие на каждом шаге динамики равновесного распределения электронов по уровням энергии. Для справедливости данного предположения необходимо, чтобы времена электронных переходов между состояниями были пренебрежимо малы по сравнению с шагом интегрирования молекулярной динамики ионов.

Данная работа направлена на изучение динамики электронных переходов с целью определения их неравновесного неадиабатического характера, который бы дал единую трактовку взаимно противоречивых экспериментальных данных. Обнаруженный в работе неадиабатический механизм переходов позволяет объяснить сильный изотопический эффект [1] и большую теплоту перехода, которая не может быть объяснена существовавшими ранее моделями [2]. В работе показана возможность формирования промежуточного экситонно-подобного молекулярного состояния, возникающего в процессе нагрева молекулярного водорода. Подобные состояния могут объяснить необычные экспериментальные данные по отражательной и поглощающей способности плотного флюида водорода при переходе из молекулярного состояния в плазму [3].

#### Литература

1. M. Zaghoo, R.J. Husband, I.F. Silvera, Phys. Rev. B, **98**,104102, **2018**
2. M. Houtup, 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**

## ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА В СВЕРХТВЕРДЫХ КОМПОЗИТАХ

Филоненко В. П.<sup>1</sup>, Анохин А. С.<sup>2</sup>, Ткаченко В. В.<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup>*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН*

<sup>3</sup>*ООО Квантовые кристаллы, Москва*

*filv@hppi.troitsk.ru*

Рекордные показатели твердости и упругих модулей могут быть достигнуты при реализации прямого фазового перехода графитоподобных заготовок в сверхтвердые алмазные или

алмазоподобные нанополикристаллические компакты [1, 2]. Но, необходимые для этого термобарические режимы (15-20 ГПа,  $\geq 2000$  °С) позволяют синтезировать только уникальные лабораторные образцы без возможности их масштабирования. А большинство сверхтвердых композитов для промышленных применений получают методами спекания порошков алмаза и кубического нитрида бора (сBN) с активирующими добавками. В основном для этого используют диапазон давлений 4-8 ГПа и температур 1400-1800°С, в которых сверхтвердые компоненты являются термодинамически устойчивыми.

Дальнейший прогресс в направлении улучшения комплекса физико-механических и эксплуатационных характеристик сверхтвердых материалов может быть достигнут за счет оптимизации размеров и морфологии исходных частиц, состава активирующих добавок и режимов спекания. Обеспечить высокий уровень свойств можно только при наличии прочных контактов сверхтвердых кристаллов между собой и со связующими фазами.

В работе представлен сравнительный анализ структуры границ раздела и принципов их формирования в нескольких типах сверхтвердых композитов. Одни композиты были синтезированы в присутствии активных флюидов из микрокристаллов алмазоподобного нитрида бора и алмаза с высокой концентрацией точечных дефектов. Эти композиты не содержали связующих фаз [3].

Второй тип композитов был получен реакционным спеканием смесей микро- и наноалмазов с активирующими добавками. Количество связующих фаз составляло в них около 10%. В этом случае необходимо обеспечить формирование в процессе спекания прочного алмазного каркаса, который будет сохранять высокий уровень характеристик и после удаления из объема металлосодержащей связки. Поэтому в наших экспериментах одним из компонентов добавки был кобальт, сплавы которого способствуют перекристаллизации углерода через расплав и сращиванию микроалмазов друг с другом.

Третий вариант получения сверхтвердых композитов рассмотрен на примере образцов, содержащих около 70% сBN. Методом реакционного спекания в системе сBN-Al-TiC с микро- и наночастицами получены крупноразмерные композиты с высоким уровнем твердости и модуля упругости, которые определяются формированием совершенных границ раздела сBN-связка-сBN (Рис. 1), а не каркасом из сверхтвердых частиц.

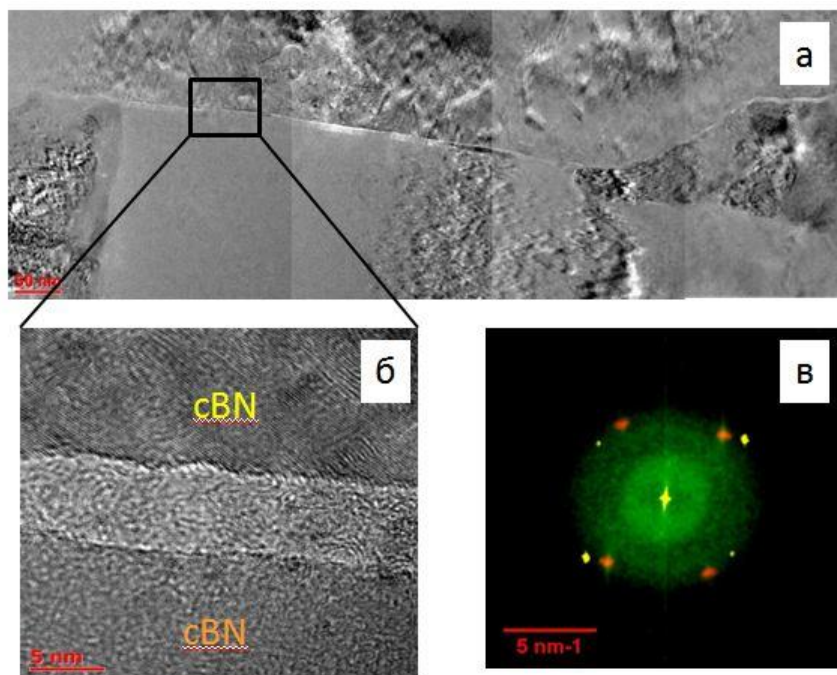


Рис. 1. Анализ границы раздела cBN-связка-cBN  
 а – просвечивающая электронная микроскопия,  
 б – высокое разрешение, в – картина электронной дифракции

Из рисунка 1 видно, что тонкий слой связки между кристаллитами cBN является рентгеноаморфным, что обеспечивает хорошее качество межфазных границ.

Исследование выполнено при поддержке грантов РФФИ №19-02-00162 и №17-02-01285.

#### Литература

1. H. Sumiya, K. Harano. *Diam. & Relat. Mater.* **24**, 44, 2012.
2. N. Dubrovinskaia, V. Solozhenko. *Appl Phys Lett.* 90:101912, 2007.
3. V. Filonenko, I. Zibrov, A. Anokhin. *Physics–Uspekhi.* **62**, 2, 2019.

## КОЛЛЕКТИВНЫЕ ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ В ЖИДКОСТЯХ, АМОΡФНЫХ И ТВЁРДЫХ ТЕЛАХ.

Норман Г. Э., Писарев В. В., Флейта Д. Ю.

<sup>1</sup>Научно-исследовательский университет «Высшая школа экономики»  
 dfleyta@hse.ru

В работе [1] были рассмотрены коллективные движения частиц в Леннард-Джонсовской жидкости, и была продемонстрирована связь

локальных коллективных движений (вихрей и джетов) с диффузией в веществе. С целью же количественного изучения особенностей поведения рассматриваются многоточечные корреляционные функции движения [2]. Использование интегральной характеристики позволяет изучать как микроскопические эффекты вихреобразования, так и влияние этих эффектов на поведение системы в целом.

В работах [3,4] с помощью данного подхода изучены фазы жидких металлов алюминия, никеля и меди с потенциалом взаимодействия ЕАМ [5,6]. Обнаружено, что выбранная за меру согласованности движения частиц вещества характеристика  $CC(T,R,\tau)$ , равная среднему косинусу между векторами смещения частиц с определенным начальным расстоянием  $R$  за характерное время  $\tau$ , претерпевает излом при переходе из стабильной в метастабильную область жидкой фазы.

Это изменение проверяется в модельной системе с потенциалом взаимодействия в виде Леннарда-Джонса, а также используется далее для обнаружения перехода переохлажденной фазы жидкого алюминия в аморфное состояние. Особенность поведения  $CC(T,R,\tau)$  проявляется при переходах пар-жидкость, жидкость-пар, жидкость-кристалл. Положение точек излома на изохоре оказалось соответственно температурам на линии бинодали для данных плотностей системы. Обнаружено уменьшение величины эффекта с ростом плотности системы и отсутствие излома при переходе в метастабильное твердое состояние.

Продемонстрировано [7], что кристаллическая фаза имеет более высокий порядок коллективных движений ввиду сильных межатомарных связей. Обнаружен эффект роста корреляций в кристалле с ростом температуры до момента пересечения бинодали из-за короткодействующих коллективных фононных волн в кристалле, приводящих к распространению движений, противодействующих попаданию частиц в неустойчивые положения между узлами кристаллической решетки (отрицательные корреляции). Отметим, что коллективизм, усиливающийся с ростом температуры в кристалле, противоположен по характеру снижающейся согласованности движения частиц жидкости при нагреве. Рост температуры увеличивает хаотичность и сокращает длину свободного пробега, однако в жидкости почти отсутствуют отрицательные корреляции (возникающие между частицами в кристалле при неустойчивой структуре). Следовательно, этот вклад

существенно влияет на согласованность движения в целом и меняет температурную характеристику коррелятора.

Исследование процесса аморфизации [8] на примере пленки алюминия обнаружило резкий рост согласованности движения частиц исключительно в первой и второй координационной сфере. Отметим, что при сравнении пространственного распределения корреляционного коэффициента  $CC(T, R, \tau)$  с радиальной функцией распределения  $g(R)$ , последняя менее точно отображает локальные максимумы распределения частиц в узлах распадающейся решетки кристалла.

Доклад подготовлен в ходе работы в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов РФ «5-100». Благодарим Суперкомпьютерные центры ОИВТ РАН и НИУ ВШЭ за предоставленное вычислительное время.

#### Литература

1. Наберухин Ю.И., Маленков Г.Г., Аникеенко А.В. ДАН, **472**, 3, **2017**
2. Angelo J.E., Foiles S., Glotzer S., Physica A, **261**, 1-2, **1998**
3. Fleita D.Yu., Norman G.E., Pisarev V.V., J. Phys.: Conf. Ser., **946**, **2018**
4. Норман Г. Э., Писарев В. В., Флейта Д. Ю., Письма в ЖЭТФ, **109**, 10, **2019**
5. Mendeleev M.I., Rahman M.J., Phil. Magazine, **89**, **2009**
6. Mishin Yu., Purja G.P., Phil. Magazine, **89**, **2009**
7. Норман Г. Э., Флейта Д. Ю., Письма в ЖЭТФ, **111**, 4, **2020**
8. Fleita D.Iu., Norman G.E., Pisarev V.V., J. Phys.: Condens. Matter, **32**, **2020**

## **ВОССОЗДАНИЕ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПО СТРУКТУРЕ НА ОСНОВЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

Хабибуллин Р. А., Мокшин А. В.

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, г. Казань  
roman.khabibullin@outlook.com*

Как известно, для воспроизведения практически всех физических свойств многочастичной системы требуется знать ее гамильтониан или часть гамильтониана, которая определяет характер межчастичного взаимодействия. Для простых модельных систем

потенциал взаимодействия обычно является известным. Однако для подавляющего большинства реальных физических систем приходится решать задачу нахождения энергии взаимодействия частиц.

В настоящей работе предлагается оригинальный метод по восстановлению потенциалов межчастичного взаимодействия, который реализуется на основе эволюционных алгоритмов [1]. В качестве входной информации используются экспериментальные данные по дифракции нейтронов и рентгеновских лучей. В частности, в рамках данного метода удается получить интересные результаты для конденсированных многочастичных систем, где межчастичное взаимодействие носит преимущественно сферически-симметричный характер. Также нами рассматривается задача о воссоздании потенциала взаимодействия молекул воды (жидкая фаза вблизи плавления) [2].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00022) и РФФИ 18-02-00407.

#### Литература

1. R. Storn, K. Price, *J. Glob. Opt.*, **11**, 341, **1997**  
A. V. de Oliveira, G. Franzese, P. A. Netz, M. C. Barbosa, *J. Chem. Phys.*, **128**, 064901, **2008**

## УПРУГИЕ СВОЙСТВА И СТЕКЛОФОРМИРУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ

Хуснутдинов Р. М., Мокшин А. В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
Институт физики, Казань, Россия  
khrm@mail.ru*

Вязкость является одной из важнейших характеристик, определяющая релаксационные особенности и транспортные свойства вещества. В то же время, температурная зависимость вязкости определяет так называемую стеклообразующую способность системы (*glass-forming ability*) через величину индекса хрупкости (*fragility index*). Косвенные экспериментальные методики, такие как неупругое рассеяние нейтронов и рентгеновских лучей, бриллюэновское рассеяние света характеризуются значительными неточностями в определении коэффициента вязкости. В то же время, определение



вязкости с помощью вискозиметрии сопряжено со значительными трудностями, обусловленные в первую очередь, низкой чувствительностью и несовершенством экспериментальных методик. Другой альтернативой в нахождении вязкости являются методы классического и квантовомеханического моделирования, которые характеризуются рядом серьезных ограничений: первые – точностью и предсказательной способностью потенциалов межатомного взаимодействия, вторые – наличием приближений в обменно-корреляционном потенциале и ограниченностью временных масштабов симуляций.

В работе исследуются вязкоупругие и квазитвердотельные свойства никельсодержащих бинарных металлических расплавов для широкой области значений температур, включая область равновесной жидкой фазы и переохлажденного расплава. Целью настоящего исследования является уточнение данных по вязкости для систем  $Al_{(100-x)}Ni_x$  и  $Fe_{(100-x)}Ni_x$ , а также выявление особенностей квазитвердотельного поведения в различных никельсодержащих металлических расплавах. Результаты моделирования для концентрационных и температурных зависимостей вязкости для этих систем находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Установлено, что значительный рост вязкости наблюдается при концентрациях никеля  $x_{Ni}=60\div 80\%$  и  $x_{Ni}=30\div 50\%$  для расплавов  $Al_{(100-x)}Ni_x$  и  $Fe_{(100-x)}Ni_x$  соответственно. Кроме того, в области низких значений концентраций  $x_{Ni}\sim 5\%$  наблюдаются аномалии, как в сдвиговой, так и кинематической вязкости для расплава  $Fe_{(100-x)}Ni_x$ . Детальный анализ упругих свойств был выполнен на основе численных расчетов модулей всестороннего сжатия и сдвига, коэффициента Пуассона и модуля Юнга. Установлено, что на диапазоне концентраций атомов никеля в системах  $Fe_{(100-x)}Ni_x$  и  $Al_{(100-x)}Ni_x$  модули упругости изменяются в 2 и 3 раза соответственно. Рассчитанные значения концентрационных зависимостей скоростей продольного и поперечного звука демонстрируют корреляцию со значениями вязкости. Ширины щелей  $k_{gap}$  в законе дисперсии поперечных коллективных мод, как для расплава  $Al_{(100-x)}Ni_x$ , так и для  $Fe_{(100-x)}Ni_x$  с температурой описываются линейными зависимостями.

Крупномасштабные атомарно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук. Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект №19-12-00022).

# МАГНЕТОКАЛОРИЧЕСКИЕ АНОМАЛИИ КАК ИНДИКАТОР ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ НАНОПРОВОЛОКАХ С СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

Шустин М. С.<sup>1</sup>, Аксенов С. В.

<sup>1</sup>*Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036,  
Красноярск, Россия*

Одной из наиболее изучаемых систем, в которой ожидается реализация топологической сверхпроводимости и майорановских связанных состояний являются полупроводниковые нанопроволоки со спин-орбитальным взаимодействием, приведенные в контакт со сверхпроводником (сверхпроводящие нанопроволоки) [1]. Недавно были поставлены эксперименты по баллистическому транспорту для гибридных структур, состоящих из сверхпроводящей нанопроволоки и квантовой точки, которые указывали на возможность реализации майорановских мод [2]. Однако консенсус в теоретической интерпретации таких экспериментов в настоящее время не достигнут [3]. Ситуацию осложняет также то обстоятельство, что имеются экспериментальные указания о возможности реализации в нанопроволоках режима сильных электронных корреляций [4]. В настоящей работе, с использованием метода ренорм-группы для матрицы плотности показывается, что в качестве инструмента идентификации топологической фазы в таких нанопроволоках могут служить измерения магнетокалорического эффекта. Последний демонстрирует серию аномалий в топологически нетривиальной области параметров, которые проявляются как в режиме слабых, так и сильных электронных корреляций [5].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 19-02-00348).

## Литература

1. R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. 105, 077001, **2010**
2. H. Zhang, C.-X. Liu et al., Nature (London) 556, 74, **2018**
3. C. Moore, T. D. Stanescu, and S. Tewari, Phys. Rev. B 97, 165302, **2018**
4. Y. Sato, S. Matsuo et.al., Phys. Rev. B 99, 155304, **2019**
5. S.V. Aksenov, A.O. Zlotnikov, and M.S. Shustin, Phys. Rev. B 101, 125431, **2020**

## СВОЙСТВА КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ МАГНЕТИТА: РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ В МОДЕЛИ 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 – известный магнитный оксид железа. В настоящее время обсуждаются новые возможности его использования в медицине и спинтронике, поэтому исследование электронных свойств магнетита - актуальная задача физики твердого тела.

При температуре  $T_V \approx 120$  К в магнетите происходит превращение, известное как переход Вервея. Этот переход сопровождается резким падением электропроводности на два порядка по величине, и, как считают, изменением симметрии кристаллической решетки. Полагают также, что выше температуры Вервея магнетит является полуметаллом, а ниже  $T_V$  в плотности его электронных состояний на  $E_F$  благодаря некоторому упорядочению носителей заряда появляется запрещенная зона. Существующие интерпретации имеющих экспериментальных данных, основанные на результатах первопринципных расчетов, позволяют говорить о возможности существования запрещенной зоны в магнетите при температурах выше  $T_V$  и о поляронном характере проводимости при  $T > T_V$  [1].

В докладе будут представлены результаты первопринципных расчетов структурных и электронных свойств кубической фазы магнетита в рамках теории функционала плотности с поправкой, способной учесть сильные корреляции d-электронов в этом оксиде (приближение DFT+U). Обсуждаются результаты и набор допущений для наиболее адекватного описания кубической фазы магнетита в рамках данного подхода [2].

### Литература

1. Liu H, Di Valentin C. Band Gap in Magnetite above Verwey Temperature Induced by Symmetry Breaking. J Phys Chem C. 2017;121:25736–25742.
2. Shutikova M.I., Stegailov V.V. Ab-initio calculations of point defects in bulk magnetite. J Phys Conf Ser. 2020 (in press)

## ВЛИЯНИЕ БОРА НА СТРУКТУРУ ГРАФИТА, ФОРМИРУЮЩУЮСЯ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Филоненко В. П., Баграмов Р. Х., Зибров И. П., Энкович П. В.  
Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН  
*enkovich@hppi.troitsk.ru*

В качестве исходного материала использовалась смесь глобулярного наноразмерного углерода (ГНУ) и субмикронного бора в атомном соотношении В/С = 1/7. Размеры частиц ГНУ составляли 20-70 нм, а частицы рентгеноаморфного бора были субмикронными. Для сравнения использовали порошок природного графита (ПГ). Из исходной смеси состава ВС7 прессовали таблетки диаметром 5 мм и помещали их в танталовую ампулу. Эксперименты проводили в аппаратах «тороид» при давлениях 5 и 7 ГПа. Температура при термобарической обработке была 1400 °С и 1700 °С, а время выдержки - 60 секунд. Полученные образцы обозначены соответственно условиям их обработки ВС7/Р/Т.

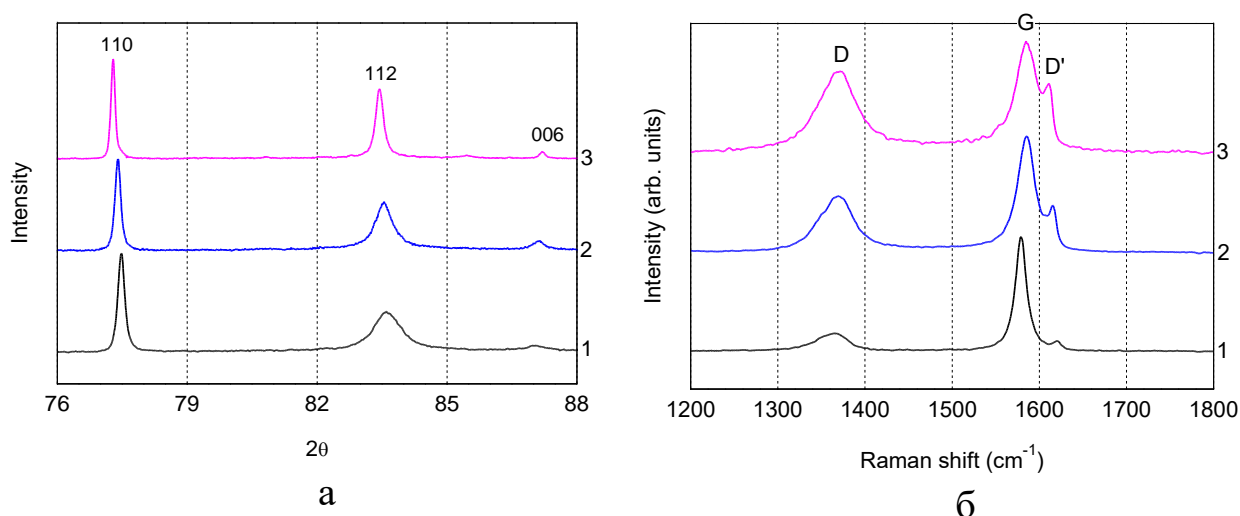


Рис. 1. Анализ образцов графита: а – участок диффрактограмм, б – Рамановские спектры (1-ГНУ/7/1700, 2-ВС7/5/1400, 3-ВС7/5/1700)

На рисунке 1 диффрактограммы образцов ВС7/5/1400 и ВС7/5/1700 показаны одновременно с диффрактограммой ГНУ/7/1700 без добавки бора. Все образцы демонстрируют упорядоченную структуру графита с различной степенью совершенства. С помощью рентгеновского анализа установлено, что расстояние между атомами

в графеновом слое образцов ВС7/5/1400 и ВС7/5/1700 больше, чем в графите из ГНУ и ПГ, а расстояние между слоями меньше.

Параметры  $a$  и  $c$  полученных графитов приведены в таблице 1. Видно, что с повышением температуры до 1700 °С различие для параметра  $a$  в сравнении с графитами без бора увеличивается до  $\approx 0.005$  Å, а параметр  $c$  при этом на  $\approx 0.018$  Å меньше. В тоже время графит в образце ВС7/5/1700 имеет самые узкие дифракционные пики, то есть формируется структура графита с высокой степенью упорядочения при высокой концентрации дефектов. Уточнение структуры образца ВС7/5/1700 с помощью полнопрофильного анализа показало, что в графеновом слое содержится около 2 ат. % бора в качестве атомов замещения. При этом наиболее вероятным является образование комплексных точечных дефектов бор-бывакансия, которые занимают в решетке закономерные позиции. Оценить высокую дефектность структуры в образцах ВС7 можно на спектрах комбинационного рассеяния (Рис. 1б): пик G этих образцов уширен, интенсивность D пика высока, имеется смещенный пик D'. Все это говорит о высокой концентрации дефектов, связанных с присутствием в графеновом слое бора, замещающего углерод.

Таблица 1

Образец	$a$ , Å	$c$ , Å
ВС7/5/1400	2.4644(1)	6.7055(6)
ВС7/5/1700	2.4670(2)	6.7035(8)
ВС7/7/1700	2.4668(2)	6.7043(13)
ГНУ/7/1700	2.4626(3)	6.7197(21)
ПГ/7/1700	2.4622(3)	6.7181(30)

Противоречивость между рентгеновскими дифракциями и Рамановскими спектрами в легированном бором графите были отмечены Nagio [1]. Это можно объяснить тем, что графит непрозрачен для света возбуждения комбинационного рассеяния и дает информацию о структуре приповерхностных слоев. С увеличением температуры графитизации растет количества бора в графеновом слое и усиливается рассеяние фононов на примесных атомах. А рентгеновский анализ показывает, что бор вносит только локальное искажение вокруг замещенных атомов при равномерном увеличении параметра решетки, поэтому пики на дифрактограммах

графита с высоким содержанием бора не уширяются. Это явление заслуживает дальнейшего исследовательского внимания.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 19-12-00111).

Литература

1. T. Nagio, M. Nakamizo, and K. Kobayashi. Carbon. **27**, 2, **1989**

## ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЛАТРАТНЫХ ГИДРАТОВ

Юнусов М. Б., Хуснутдинов Р. М., Мокшин А. В.  
*Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
Институт физики, Казань, Россия  
mikhamadbek@mail.ru*

Клатратные гидраты – это кристаллические соединения, которые состоят из каркаса, образованного молекулами воды, и полостей, в которые включены молекулы-гости. Гидраты природного газа представляют большой интерес для исследований. Во-первых, они рассматриваются как источник углеводородного топлива. По оценкам специалистов, запасы газа в гидратах составляют около  $2 \cdot 10^{16}$  м<sup>3</sup>, что на порядки превосходит запасы обычного природного газа. Во-вторых, в газовой отрасли остро стоит проблема гидратообразования в стволах скважин и газопроводах. Природный газ в трубах отлагается на стенках в виде гидратов, что снижает эффективность её добычи.

В настоящей работе представлены результаты первопринципного молекулярно-динамического исследования электронных и теплофизических свойств гидрата метана с кубическими структурами КС-I и КС-II. На основе результатов рентгеноструктурного анализа Штакельберга и Мюллера, а также алгоритма оптимизации положений атомов водорода с помощью правил Бернала-Фаулера получены кристаллические структуры клатратных гидратов КС-I и КС-II. Гидрат метана получен путем внедрения в свободные полости ячейки молекул CH<sub>4</sub>. Каждая из ячеек моделирования имела размер 12×12×12 Å и включала 178 атомов. Крупномасштабные квантово-механические расчеты выполнялись в программном комплексе VASP для широкой области температур

$T = [200; 300]$  К. Шаг по температуре составил 20 К. Моделирование выполнялось в изотермически-изохорическом (NVT)-ансамбле. Для установления состояния термодинамического равновесия был применен термостат Нозе-Гувера. Во избежание нежелательных поверхностных явлений и эффекта конечномерной системы, на моделируемую ячейку по всем направлениям были наложены периодические граничные условия. Базисный набор состоял из плоских волн, электрон-ионное взаимодействие осуществлялось с помощью ультрамягких сглаженных псевдопотенциалов, обменно-корреляционный функционал использовался в приближении Бекке-Ли-Янга-Парра (BLYP).

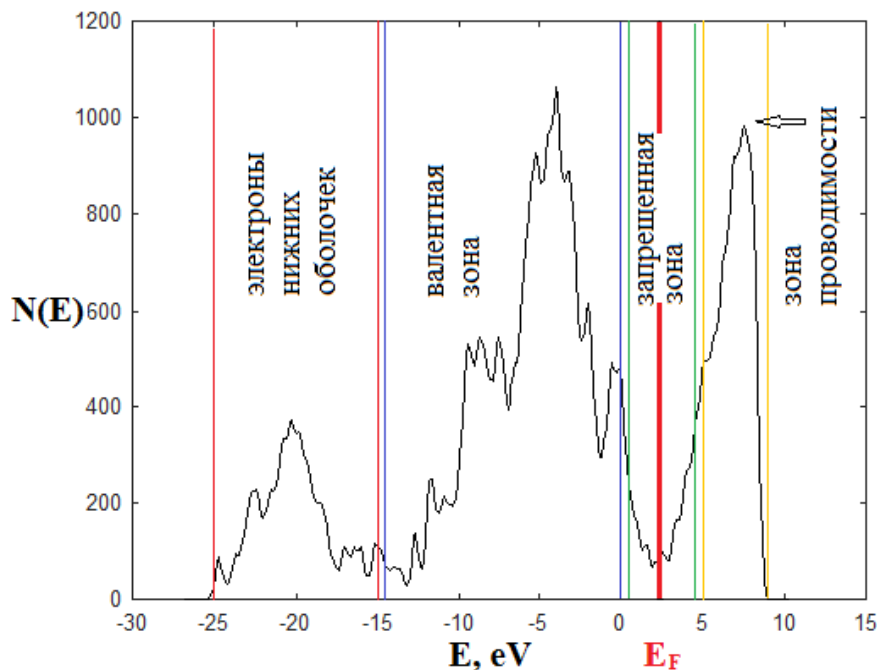


Рис.1. Плотность электронных состояний системы при  $T=200$  К для газового гидрата со структурой КС-I.

На основе данных моделирования была найдена температурная зависимость полной энергии системы в диапазоне температур  $200 \div 300$  К, которая была аппроксимирована следующей линейной зависимостью:

$$E(T) = 3.748 \cdot 10^{-21} \cdot T + 1.374 \cdot 10^{-16} \text{ (Дж)}.$$

Средняя теплоемкость при постоянном объеме рассчитывалась по формуле:

$$C_v = \frac{dQ}{dT} = \frac{dE + pdV - \mu dN}{dT} = \frac{dE}{dT}.$$

Полученное значение составило  $2362.5 \text{ Дж/кг}\cdot\text{K}$ , что хорошо согласуется с экспериментальным значением для гидрата метана ( $2160\pm 100 \text{ Дж/кг}\cdot\text{K}$ ). Для структуры КС-I была получена плотность электронных состояний (см. рис.1), а также детально исследованы температурные зависимости ширины запрещенной зоны  $\Delta E_G$  и положения уровня ферми  $E_F$ .

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук. Работа поддержана грантом РФФИ (№18-02-00407-а).



*Научное издание*

ХІХ Всероссийская конференция  
«Проблемы физики твердого тела и высоких давлений»

Тезисы  
г. Сочи, 18–27 сентября 2020 г.

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

*Авторская редакция*

Подписано в печать 26.08.2020. Формат 60×84 1/16.  
П.л. 10,4 Тираж 140 экз.

Издательство Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук  
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 53