

XV Сибирский семинар
по высокотемпературной сверхпроводимости
и физике наноструктур «ОКНО-2025»



СБОРНИК ТЕЗИСОВ



г. Омск, 2025

Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского

**XV Сибирский семинар
по высокотемпературной сверхпроводимости
и физике наноструктур
ОКНО-2025**

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ

21 - 25 октября 2025 года

г. Омск

Омск, ОмГУ, 2025 г.

Сборник тезисов докладов XV Сибирского семинара по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2025.

Сборник содержит тезисы докладов молодых учёных, приглашённых пленарных докладчиков, представленных на XV Сибирском семинаре по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2025, организованном совместно ИНХ СО РАН, НГУ, НГТУ, СФУ, ИФ СО РАН, ОмГУ. Материалы семинара содержат в краткой форме результаты исследований различных научных школ России. Тематика семинара объединяет фундаментальные и прикладные проблемы, связанные со сверхпроводящими материалами (включая наноструктуры), природой сверхпроводимости, физикой наноструктур, магнитных плёнок и спинтроники. Приглашённые и пленарные доклады представлены руководителями ведущих научных групп и отражают самые современные исследования сверхпроводимости, физики наноструктур и моделирования перспективных материалов в России. Устные доклады представлены молодыми учёными, аспирантами и студентами государственных университетов и институтов РАН. Тезисы докладов представлены в авторской редакции.

Организационный комитет

Сопредседатели

Прудников Павел Владимирович (д.ф.-м.н., профессор, ОмГУ, ЦНХТ ИК СО РАН, г. Омск), prudnikov_pavel@mail.ru

Овчинников Сергей Геннадьевич (д.ф.-м.н., профессор, ИФ СО РАН, СФУ, г. Красноярск)

Кузнецов Виталий Анатольевич (к.т.н., ИНХ СО РАН, НГТУ, г. Новосибирск)

Члены оргкомитета

Мамонова Марина Владимировна (к.ф.-м.н., доцент, ОмГУ, г. Омск)

Потуданская Мария Геннадьевна (к.б.н., доцент, ОмГУ, г. Омск)

Струнин Владимир Иванович (д.ф.-м.н., профессор, ОмГУ, г. Омск)

Вакилов Андрей Николаевич (д.ф.-м.н., профессор, ОмГУ, г. Омск)

Сычев Сергей Александрович (к.ф.-м.н., доцент, зав. лаб., ОмГУ, г. Омск)

Серопян Геннадий Михайлович (к.ф.-м.н., доцент, зав. лаб., ОмГУ, г. Омск)

Ейхлер Алексей Викторович (инженер, ОмГУ, г. Омск)

Журавлева Анастасия Романовна (секретарь, ОмГУ, г. Омск)

Технический секретарь семинара

Малярченко Петр Николаевич (к.ф.-м.н., зав. лаб., ОмГУ, г. Омск),
MalarenkoPN@omsu.ru

Страница семинара:

<https://events.omsu.ru/okno-2025>



Телеграм-канал семинара:

https://t.me/okno_25



e-mail: okno-2025@omsu.ru

Организаторы



**Омский
государственный
университет**
им. Ф.М. Достоевского

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



**Институт физики им. Л.В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук -
обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН,
г. Красноярск**



**Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск**



**СИБИРСКИЙ
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

**SIBERIAN
FEDERAL
UNIVERSITY**

**Сибирский федеральный
университет, г. Красноярск**



**Федеральный исследовательский центр
«Красноярский научный центр
Сибирского отделения Российской академии наук»,
г. Красноярск**



**НГТУ
НЭТИ**

**Новосибирский государственный
технический университет, г. Новосибирск**

Финансовая поддержка



**Департамент корпоративных Систем
ГК ЛАНИТ, г. Омск**



ЛАНИТ – «ЛАборатория Новых Информационных Технологий» – ведущая в России и СНГ многопрофильная группа ИТ-компаний. Создана в 1989 году. Занимает лидирующие позиции в различных сегментах рынка (системная интеграция, дистрибуция, консалтинг, инженерные системы, ИТ-аутсорсинг, сервис, обучение) и предоставляет полный комплекс ИТ-услуг, число которых неуклонно увеличивается за счет освоения передовых и наиболее востребованных технологий и решений. Партнер ведущих производителей оборудования и программных продуктов.

В группе компаний ЛАНИТ работает стабильная и высокопрофессиональная команда общей численностью 14 500 человек.

Входит в ТОП-50 лучших отечественных работодателей по результатам рейтинга HeadHunter в 2024 году, занимает шестое место в рейтинге лучших ИТ-работодателей России по версии «Хабр Карьеры».

www.lanit.ru

СОДЕРЖАНИЕ

Моделирование перспективных материалов

<u>П.В. Прудников</u> , М.В. Мамонова, Р.А. Сухачев, Д.А. Льготина, А.А. Чубарова, Д.А. Сергеичева, Д.А. Друзьев, Д.А. Лихтнер.....	10
--	----

Особенности электронных взаимодействий углеродных нанотрубок с инкапсулированными соединениями

<u>А.В. Окотруб</u>	11
---------------------------	----

Загадочная природа псевдощелевого состояния в купратах

<u>С.Г. Овчинников</u> , М.М. Коршунов, Е.И. Шнейдер, С.В. Николаев, В.И. Кузьмин	12
---	----

Описание структуры фторированных графитов согласно их диэлектрическому и магнитному откликам

<u>М.А. Гребёнкина</u> , Д.В. Пинаков, А.Н. Лавров, Л.Г. Булушева, А.В. Окотруб.....	13
--	----

Исследование зависимости электрических и сенсорных свойств сетей ОУНТ от параметров получения

<u>Т.А. Герасева</u> , В.И. Сысоев, А.В. Окотруб.....	14
---	----

Влияние кислородных групп одностенных углеродных нанотрубок на коэффициент термоэдс полимерных композитов на их основе

<u>В.А. Ермаков</u> , Б.Ч. Холхоев, В.Ф. Бурдуковский, В.А. Кузнецов.....	15
---	----

Влияние допирования кислородом на электрофизические свойства слоистых оксидов $\text{YBaCo}_{3.5}\text{Al}_{0.5}\text{O}_{7+x}$

<u>Д.И. Фролов</u> , Е.Н. Ткачев, А.Н. Лавров, М.Ю. Каменева, Л.П. Козеева, Д.И. Гапич, В.А. Ермаков, В.А. Кузнецов.....	16
---	----

Электрофизические свойства соединения $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ в зависимости от содержания кислорода

<u>Д.И. Гапич</u> , Д.И. Фролов, А.Н. Лавров, В.А. Кузнецов.....	17
--	----

Взаимосвязь релаксационных процессов и электрофизических свойств слоистых кобальтатов $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$

<u>Д.В. Побеленская</u> , Д.И. Гапич, Д.И. Фролов, А.Н. Лавров, В.А. Кузнецов.....	18
--	----

Влияние структурно-морфологических характеристик углеродных наноструктур на их эффективность в гипертермических приложениях

<u>О.А. Гурова</u> , Е.В. Шляхова, А.В. Окотруб.....	19
--	----

Взаимосвязь морфологии и тензорезистивных свойств электропроводящих полимерных композиционных материалов

<u>А.А. Федоров</u> , Б.Ч. Холхоев, В.Ф. Бурдуковский, А.Ю. Ларичкин, В.Е. Колодезев, В.Л. Кузнецов, С.И. Мосеев, В.А. Кузнецов.....	20
---	----

SNS-андреевская спектроскопия сверхпроводящего поликристаллического пниктида недодопированного состава $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ с $x=0.07$.

<u>А.Д. Ильина</u> , И.А. Никитченко, С.А. Кузьмичёв, К.С. Перваков, В.А. Власенко, А.С. Медведев, Т.Е. Кузьмичёва.....	21
--	----

Исследование лазерного напыления YBCO плёнок теневым методом	
<u>А.В. Дуранова, Г.М. Серопян</u>	23
Разработка элементов электроники на основе полимерных электропроводящих композиционных материалов	
<u>В.А. Кузнецов</u>	25
Полярные эффекты в обменном взаимодействии коррелированной pd-системы	
<u>А.В. Дударев, Е.И. Шнейдер, С.В. Николаев</u>	26
Одно- и двухчастичные корреляционные функции в кластерной теории возмущений	
<u>В.И. Кузьмин, С.В. Николаев, М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников</u>	28
Исследование синтеза сверхпроводящей поликристаллической керамики $SmBaCuO$	
<u>С.А. Сычев, Г.М. Серопян, Д.В. Федосов</u>	29
Сверхпроводимость в многозонной модели сверхпроводящих соединений железа для реалистичной поверхности Ферми	
<u>Е.А. Ларионов, М.М. Коршунов</u>	31
Электронная структура монослоя CuO в парамагнитной фазе с учетом кулоновских взаимодействий	
<u>И.А. Макаров, А.А. Слободчиков, И.А. Некрасов, Ю.С. Орлов, Л.В. Бегунович, М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников</u>	32
Оптимизация алгоритмов моделирования спектров поглощения и флуоресценции каротиноидов для применения на различных аппаратных платформах	
<u>А.Н. Самарин, Д.Д. Чесалин, В.А. Курков, Н.Н. Реутский, Р.Ю. Пищальников</u>	34
Скейлинговое поведение сложных низкоразмерных спиновых систем	
<u>М.А. Шляхтич, П.В. Прудников, И.К. Сайфутдинов</u>	36
Влияние спин-орбитального взаимодействия на поверхность ферми и зонную структуру в десятиорбитальной модели ферропниктидов	
<u>Д.А. Иванов, М.М. Коршунов</u>	38
Оптимизация приближения среднего поля для модельного ортоникелата	
<u>С.В. Нужин, Ю.Д. Панов, А.С. Москвин, В.А. Улитко</u>	40
Термодинамика перехода между $S_{\pm}$- и S_{++}-состояниями в сверхпроводниках на основе железа при низких температурах	
<u>В.А. Шестаков, М.М. Коршунов</u>	41
Первопринципные расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика	
<u>Д.В. Евсин, М.В. Мамонова, П.В. Прудников</u>	42
Квантовая макрофизика: структурные и оптические особенности периферического антенного комплекса пурпурных бактерий	
<u>М.М. Коршунов, Е.А. Ковалева, Л.В. Бегунович</u>	44

Моделирование методами Монте-Карло магнитных свойств спин-вентильных наноструктур	
<u>Е.В. Дроворуб, П.В. Прудников</u>	45
Энтропийные методы моделирования фазовых переходов в анизотропных системах с конкурирующими взаимодействиями	
<u>Д.А.Друзьев, П.В. Прудников</u>	46
Моделирование трехмерной модели Гейзенберга методами машинного обучения	
<u>И.А. Мамонов, П.В. Прудников</u>	47
Исследование влияния дефектов структуры на поведение гейзенберговских спиновых систем	
<u>В.В. Хитринцева, П.В. Прудников</u>	49
Расчет обменного взаимодействия в ультратонких пленках Fe, Ni, Co и их бинарных соединений	
<u>М.Ю. Макеев, М.В. Мамонова</u>	51
Исследование влияние квантовых шумов на точность гибридного алгоритма VQE	
<u>А.Р. Журавлева, П.И. Коцур, А.Н. Вакилов</u>	53
Применение методов машинного обучения для нахождения основного состояния двумерной спиновой системы	
<u>Д.А. Лихтнер, П.В. Прудников</u>	55
Исследование интеркаляции лития в углеродные структуры	
<u>Е.Е. Жойдик, П.В. Прудников</u>	57
Реализация квантового преобразования Фурье на кудитном процессоре	
<u>А.А. Минсеева, А.Н. Вакилов</u>	58
Численное исследование кристаллической структуры, магнитных и обменных свойств сплава TiFeS	
<u>А.П. Царева, М.В. Мамонова</u>	60
Моделирование магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика на гексагональной плотноупакованной решетке	
<u>Д.А. Сергеичева, П.В. Прудников</u>	62
Исследование структурных изменений поверхности стали У8 после воздействия ионным пучком	
<u>А.С. Витершпан, Т.В. Панова, В.С. Ковивчак</u>	64
Расчет адгезионных и триботехнических характеристик для металлических поверхностей методом диэлектрического формализма	
<u>Е.С. Гомац, М.В. Мамонова</u>	66
Исследование неравновесного поведения динамического фазового перехода в модели Гейзенберга	
<u>А.В. Ейхлер, П.В. Прудников</u>	68

ТЕЗИСЫ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ

**П. В. Прудников¹, М. В. Мамонова², Р. А. Сухачев¹, Д. А. Льготина¹,
А. А. Чубарова¹, Д. А. Сергеичева¹, Д. А. Друзьев², Д. А. Лихтнер²**

¹*Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644044, Омск, Россия*

²*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия*

*e-mail: prudnikp@ihcp.ru

В докладе будут представлены различные подходы моделирования конденсированных систем: от ультратонких магнитных пленок до углеродных материалов [1]. Отдельное внимание в докладе будет уделено компьютерному моделированию гелимагнетиков [2] и синтетических гетероструктур с учетом влияния эффектов анизотропии [3, 4]. Наномасштабная периодичность создает в магнитных структурах мезоскопические эффекты пространственной спиновой корреляции с медленной релаксационной динамикой [5].

В связи с тем, что современное моделирование невозможно без использования вычислительных ресурсов, то в докладе будут обсуждаться современные высокопроизводительные вычислительные системы. Прогресс атомистического моделирования существенно ограничен вычислительными затратами на методы воспроизведения электронной структуры методами функционала плотности. В докладе будут обсуждаться возможности использования машинного обучения, которые позволяют существенно ускорить процесс вычислений [6,7].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0039).

Литература:

[1] R.A. Sukhachev, M.V. Mamonova, P.V. Prudnikov, A.V. Lavrenov, Carbon defects applied to alkali-ion batteries: a density functional theory study, Russian Journal of Physical Chemistry A. 99, 1335 (2025) <https://doi.org/10.1134/S0036024425700694>

[2] A.A. Tereshchenko, V.I. Sinitsyn, I.G. Bostrem, P.V. Prudnikov, A.S. Ovchinnikov, J. Kishine, Emergent elasticity and wavelike to particle-like crossover in a magnetic chiral soliton lattice, Physical Review B 10, 144426 (2024) <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.110.144426>

[3] M.M. Boldyreva, D.A. Druzev, V.O. Borzilov, I.K. Saifutdinov, N.I. Piskunova, M.V. Mamonova, V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, The Influence of Anisotropy on the Manifestation of Aging Effects in the Magnetoresistance of Multilayer Structures, Progress of Theoretical and Experimental Physics 053I01 (2025) <https://doi.org/10.1093/ptep/ptaf058>

[4] D.A. Lgotina, V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, Non-equilibrium relaxation dynamics of an asymmetric Co/Cu/Co heterostructure: A Monte Carlo Study, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 58, 295001 (2025) <https://doi.org/10.1088/1751-8121/adedd8>

[5] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова, Успехи физических наук 187, 817 (2017) <https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.02.038067>

[6] Д.А. Льготина, Р.А. Сухачев, А.А. Чубарова, Д.А. Сергеичева, Л.Н. Степанова, Ю.Г. Малиновский, П.В. Прудников, А.В. Лавренов, Методы моделирования процесса высокотемпературного превращения природного газа, Теоретические основы химической технологии, (2025)

[7] Д.А. Друзьев, А.А. Чубарова, П.В. Прудников, Фазовые превращения в гейзенберговских магнетиках, индуцированные одноосной анизотропией: моделирование методами Ванга–Ландау и машинного обучения, Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 122, 156 (2025) <https://doi.org/10.1134/S0021364025607080>

Особенности электронных взаимодействий углеродных нанотрубок с инкапсулированными соединениями

А.В. Окотруб*

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090*

*e-mail: spectrum@niic.nsc.ru

Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ), обладающие замкнутым внутренним пространством и защищенным химически стойкими оболочками, могут быть заполнены разными типами неорганических соединений, что приводит к изменениям электронного состояния поверхности и позволяет регулировать положение уровня Ферми. Соединения внутри нанотрубок ограничены стенками ОУНТ и могут находиться в нестандартных химических состояниях, что само по себе представляет интерес для систематических исследований. В нашей работе мы использовали ОУНТ производства компании ОКСИАЛ заполненные серой, фосфором, селеном, мышьяком и их соединениями. Морфология ОУНТ и химическое состояние углеродных стенок и внутренних компонент были проанализированы с помощью методов просвечивающей электронной микроскопии, комбинационного рассеяния, термогравиметрического анализа, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии тонкой структуры ближнего рентгеновского поглощения и рентгеновской флуоресценции высокого разрешения. Экспериментально продемонстрированы донорно-акцепторные взаимодействия между инкапсулированными серой, фосфором и ОУНТ. Показано, что S@ОУНТ обладают выдающейся чувствительностью к содержанию в газовой фазе диоксида азота на уровне единиц ppb благодаря увеличенному переносу заряда между нанотрубками и адсорбированными молекулами. Методом оптической пикосекундной накачки с терагерцовым зондированием были установлены величины переноса электронной плотности в фосфорсодержащих нанотрубках. Во внутренней полости ОУНТ, рассматриваемой как нанореактор, были синтезированы соединения серы и фосфора разного стехиометрического состава. Продemonстрировано, что химическое состояние сульфидов фосфора соответствует внутреннему давлению в полости нанотрубок ~ 15 ГПа.

ЗАГАДОЧНАЯ ПРИРОДА ПСЕВДОЩЕЛЕВОГО СОСТОЯНИЯ В КУПРАТАХ

С.Г. Овчинников^{1*}, М.М. Коршунов^{1,2}, Е.И. Шнейдер¹, С.В. Николаев^{1,2}, В.И. Кузьмин¹

¹*Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия*

²*Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия*

*e-mail: sgo@iph.krasn.ru

Обсуждаются результаты расчетов электронной структуры и фазовой диаграммы купратов в рамках многоэлектронных подходов с учетом сильных электронных корреляций. Наши ранние расчеты в рамках обобщенного метода сильной связи (ГТВ) показали зависимость электронной структуры от допирования с двумя переходами Лифшица с изменением топологии поверхности Ферми при концентрациях дырок $\rho_{s1}=0.15$ и $\rho_{s2}=0.24$. В рамках ГТВ подхода удалось также описать сверхпроводящую фазу с учетом магнитного и фононного механизмов спаривания. Результаты для сверхпроводящей фазы и критические точки переходов Лифшица близки к экспериментальным данным, но сами изменения поверхности Ферми в нормальной фазе в рамках ГТВ подхода не согласуются с экспериментальными данными по ARPES спектроскопии. Для более точного описания электронной структуры купратов мы провели расчеты в рамках кластерной теории возмущений (СРТ) с точным учетом ближних магнитных корреляций внутри каждого кластера. При покрытии решетки кластерами 4×4 мы точно учитываем корреляции вплоть до 9-ых соседей. Такой расчет позволил нам воспроизвести природу псевдощелевых состояний при разных концентрациях допирования.

Работа поддержана грантом РФФ 24-12-00044

ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ ФТОРИРОВАННЫХ ГРАФИТОВ СОГЛАСНО ИХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМУ И МАГНИТНОМУ ОТКЛИКАМ

М.А. Гребёнкина^{1*}, Д.В. Пинаков¹, А.Н. Лавров¹, Л.Г. Булушева¹, А.В. Окотруб¹

¹ *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН (ИНХ СО РАН), 630090, Новосибирск, Россия*

*e-mail: grebenkina@niic.nsc.ru

Для использования материалов на основе графита в практических приложениях необходима контролируемая настройка их свойств. Химическая модификация графита путём фторирования позволяет получить широкий набор материалов с различными значениями электрофизических параметров. Характеристики фторированного графита во многом зависят от особенностей состава и строения материала: степени фторирования, организации атомов фтора вдоль слоёв, присутствия внедрённых молекул в межслоевом пространстве и их взаимодействия между собой и с матрицей фторированного графита. Взаимосвязь между свойствами и структурой позволяет получать дополнительные сведения о строении фторированного графита через измерение и анализ характеристик материала. Так диэлектрические и магнитные свойства фторированного графита подвержены влиянию организации внедрённых молекул в межслоевом пространстве и характера распределения атомов фтора вдоль слоёв материала соответственно.

В данной работе были исследованы диэлектрические и магнитные свойства фторированных графитов CF_x , где $0,04 \leq x \leq 0,52$, с внедрёнными в межслоевое пространство Br_2 , CH_3CN , CCl_4 и CH_2Cl_2 . Исследованные материалы были получены с помощью фторирования при комнатной температуре в парах смеси Br_2 и BrF_3 и представляли собой преимущественно интеркалированные соединения второй стадии. Показано, что диэлектрическая проницаемость увеличивается при уменьшении содержания фтора и материалы с составом CF_x , где $x \leq 0,30$, являются проводниками. Вымораживание движения внедрённых молекул, обладающих дипольным моментом, приводит уменьшению диэлектрической проницаемости фторированного графита при понижении температуры. Были выделены вклады в магнитную восприимчивость от диамагнетизма Ланжевена атомов углерода, фтора и внедрённых молекул, парамагнетизма Паули, вызванного присутствием электронов проводимости, парамагнетизма Кюри-Вейсса, связанного с парамагнитными центрами, создаваемыми при переносе заряда при образовании связи C-F, и орбитального диамагнетизма, возникающего при наличии π -сопряжённых областей. Соотнесение величины орбитального диамагнетизма со средним размером сопряжённых участков, определённым через моделирование распределения атомов фтора [1], продемонстрировало, что данный вклад в магнитную восприимчивость становится незначительным относительно других компонентов для степеней фторирования $x \geq 0,3$, при которых сопряжённая π -система в основном разбита атомами фтора. Полученная оценка показала, что для значимого вклада орбитального диамагнетизма материал должен содержать нефторированные участки из более, чем 100 сопряжённых гексагонов. Также обнаружено, что замена внедрённых молекул не приводит к изменению величины орбитального диамагнетизма. Для парамагнетизма Кюри-Вейсса не было выявлено зависимости от степени фторирования графита, что может быть связано с организацией атомов фтора в кластеры, при этом парамагнитные центры создают только краевые атомы в данных участках.

Авторы благодарят Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, проект 125021001790-0.

[1] R.D. Yamaletdinov, Y.A. Nikiforov, L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub, *Nanoscale* **13**, 1206 (2021)

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И СЕНСОРНЫХ СВОЙСТВ СЕТЕЙ ОУНТ ОТ ПАРАМЕТРОВ ПОЛУЧЕНИЯ

Т.А. Герасева^{1,2*}, В.И. Сысоев¹, А.В. Окотруб¹

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаевна СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия

²Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия

*e-mail: t.geraseva@g.nsu.ru

Резистивные газовые сенсоры широко используются при необходимости определения наличия и концентрации примесей в воздухе благодаря своей дешевизне, компактности и возможности миниатюризации. Одним из наиболее перспективных чувствительных материалов для такого вида сенсоров являются углеродные нанотрубки (УНТ), т.к. они обладают высоким аспектным соотношением и обширной сопряжённой π -системой, что обеспечивает им высокую площадь поверхности и подвижность носителей заряда, высокие тепло- и электропроводности, а также химическую устойчивость. Т.к. создание устройства на основе единичной УНТ является затруднительным, чаще всего в качестве чувствительного материала рассматривается структура из нанотрубок.

В данной работе речь идёт о сетях из коммерческих одностенных УНТ (ОУНТ) марки TUBALLTM, произведённых компанией OCSiAl. Формирование сети происходит при нанесении суспензии ОУНТ на нитроцеллюлозную мембрану методом вакуумного фильтрования и является стохастическим процессом. Цель работы заключалась в изучении зависимости электрических и сенсорных свойств сети ОУНТ от пространственной организации и влияние на неё параметров получения. Результатом работы стало определение параметров получения, обеспечивающих наибольшую повторяемость для некоторых концентраций тонких плёнок ОУНТ: более 65% для плёнок с концентрацией 0,1 мл суспензии и более 85% - для концентрации 0,15 мл в интервале сопротивлений $\pm 10\%$ от $R_{\min}$.

В качестве основного параметра, отвечающего за пространственную организацию и оказывающего наибольшее влияние на электрические свойства, было выбрано количество активных узлов связи между ОУНТ. Ключевым параметром получения - конечное давление фильтровальной системы. Статистическая оценка зависимости профилей проводимости плёнок ОУНТ от конечного давления проводилась при помощи программы, написанной на языке JavaScript. Оценка корреляции между проводимостью участков тонких плёнок и количеством пересечений в них ОУНТ устанавливалась на основании снимков, полученных при помощи растровой электронной микроскопии. Снимки были обработаны программой, написанной на языке Python с использованием детектора Кэнни. Для исследования зависимости сенсорных свойств сети ОУНТ от проводимости были изготовлены газовые

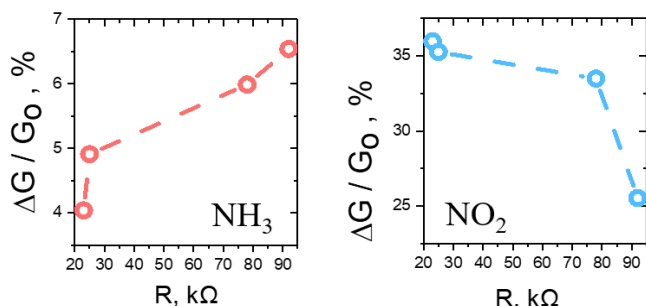


Рис. 1. Зависимости величин откликов сенсоров надонорный (слева) и акцепторный (справа) модельные газы от их сопротивления.

сенсоры, основанные на участках плёнки с разными сопротивлениями, и получены их отклики на модельные газы донорного (аммиак) и акцепторного (диоксид азота) типов. Согласно зависимостям величины откликов получившихся сенсоров от их сопротивления, представленным на Рис. 1, можно говорить о наличии связи между

селективностью сети исходных ОУНТ и её пространственной организацией.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ №24-73-10039

ВЛИЯНИЕ КИСЛОРОДНЫХ ГРУПП ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА КОЭФФИЦИЕНТ ТЕРМОЭДС ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ИХ ОСНОВЕ

В. А. Ермаков^{1*}, Б. Ч. Холхоев², В. Ф. Бурдуковский², В. А. Кузнецов^{1,3}

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия

²Байкальский институт природопользования СО РАН, 670047, Улан-Удэ, Россия

³Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия

*e-mail: vova.ermakov111@gmail.com

Создание и исследование новых материалов для гибкой электроники является одной из важных задач. Одними из перспективных материалов для решения этих задач могут выступать композиционные материалы на основе полимерной матрицы и электропроводящего наполнителя. В качестве электропроводящего наполнителя для данных композитов используются различные нанонаполнители. В частности, используются одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ), поскольку они имеют высокое аспектное соотношение и способны создавать устойчивые коллоидные дисперсии в растворах полимеров.

В данной работе представлены температурные зависимости коэффициента термоЭДС $S(T)$ и электросопротивления $R(T)$ для гибких композитов на основе диэлектрической полимерной матрицы представителя семейства полибензимидазолов поли-2,2'-(*n*-оксидифенилен)-5,5'-добензимидазола (ОПБИ) и коммерческих ОУНТ фирмы OCSiAl. Образцы были синтезированы в Байкальском институте природопользования СО РАН по методике, описанной в [1]. Были получены композиты ОПБИ-ОУНТ с содержанием ОУНТ от 1 до 5 масс. %.

В процессе температурного отжига до температуры 300 °С в условиях высокого вакуума (давление не более 10^{-3} Па) наблюдается смена знака коэффициента термоЭДС с положительного на отрицательный и многократное увеличение электросопротивления. При возвращении образцов в условия комнатного воздуха, коэффициент термоЭДС и электросопротивление релаксируют к исходным значениям. При последующих нагревах композитов на воздухе и далее в высоком вакууме, наблюдается смещение зависимостей коэффициента термоЭДС в положительную область. При нагреве образцов в условиях высокого вакуума до температуры 350 °С значение коэффициента термоЭДС возвращается к значению, полученному при первом отжиге. Данный характер зависимостей может говорить о том, что в процессе температурного отжига в условиях высокого вакуума происходит удаление кислородных групп, выполняющих роль акцепторной примеси, с поверхности нанотрубок, что и приводит к многократному увеличению электросопротивления и изменению знака коэффициента термоЭДС. Характер зависимостей образцов композитов после температурных отжигов на воздухе и дальнейших отжигов в условиях высокого вакуума может говорить о перераспределении кислородных групп на поверхности ОУНТ. При термоциклировании в условиях вакуума зависимости коэффициента термоЭДС и электросопротивления воспроизводились, что может говорить о термической стабильности полученных композитов вплоть до 350 °С.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-10223, <https://rscf.ru/project/24-79-10223/>.

[1] Kuznetsov V.A., Fedorov A.A., Kholkhoev B.Ch. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2023. V. 68. P. 221.

ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ КИСЛОРОДОМ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ ОКСИДОВ $\text{YBaCo}_{3.5}\text{Al}_{0.5}\text{O}_{7+x}$

Д.И. Фролов*, Е.Н. Ткачев, А.Н. Лавров, М.Ю. Каменева, Л.П. Козеева, Д.И. Гапич,
В.А. Ермаков, В.А. Кузнецов

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия

*e-mail: frolov.dmi3@gmail.com

Были проведены исследования температурных зависимостей удельного электросопротивления, коэффициента термоЭДС и магнитного момента для соединений $\text{YBaCo}_{3.5}\text{Al}_{0.5}\text{O}_{7+x}$ с содержанием кислорода x от 0 до 1.27. Экспериментальные образцы были изготовлены с помощью твердофазного синтеза, в результате чего были получены поликристаллические соединения с пространственной группой $R\bar{6}_3\text{mc}$. Содержание кислорода изменялось посредством оригинальной методики отжига в вакуумной и кислородной среде, что позволило варьировать содержание кислорода x с точностью до 0.001. Удельное электросопротивление было измерено в диапазоне температур от 68 до 350 К с помощью четырехконтактного метода. Зависимость коэффициента термоЭДС от температуры была измерена дифференциальным методом измерения [1] в диапазоне температур от 77 до 573 К. Для измерений ниже комнатной температуры образец опускался в транспортный сосуд Дьюара с жидким азотом или жидким гелием. Измерения выше комнатной температуры производились в экспериментальной установке с возможностью создания высокого вакуума и нагрева до 400°C.

На основе измеренных температурных зависимостей удельного электросопротивления $\text{YBaCo}_{3.5}\text{Al}_{0.5}\text{O}_{7+x}$ было обнаружено, что на всём исследованном температурном диапазоне наблюдается рост удельного электросопротивления, описываемый механизмом прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка по закону Эфorsa-Шкловского (механизм кулоновской щели). Для содержаний кислорода x от 0 до 0.51 значения удельного электросопротивления практически не изменяются, а для значений x выше 0.51 удельное электросопротивления уменьшается.

Магнитные свойства были исследованы с помощью СКВИД-магнитометра MPMS Quantum Design в полях 0.1 и 1 Тл и температуре от 1.77 до 350 К. Далее были рассчитаны температурные зависимости магнитной восприимчивости и эффективного магнитного момента, по которым было установлено, что соединение является сильно фрустрированным антиферромагнетиком который ниже температуры 40 К переходит в состояние спинового стекла. На основе эффективного магнитного момента было рассчитано, что Co^{2+} в соединении находится преимущественно в высокоспиновом состоянии.

По измеренным температурным зависимостям коэффициента термоЭДС было получено, что с увеличением содержания кислорода коэффициент термоЭДС уменьшался для всех измеренных содержаний x . По значению коэффициента термоЭДС было подтверждено, что основными носителями заряда являются дырки. Далее по усовершенствованной формуле Хайкеса [2] для соединений со смешанной валентностью были теоретически рассчитаны спиновые состояния Co^{3+} . Это позволило сделать предположение о причине отсутствия роста удельного электросопротивления при содержаниях кислорода от 0 до 0.51 для соединений $\text{YBaCo}_{3.5}\text{Al}_{0.5}\text{O}_{7+x}$.

[1] A.T. Burkov, A.I. Fedotov, A.A. Kasyanov et al., Sci. Tech. J. Inf. Technol. Mech. Opt. **15**, 173 (2015).

[2] J.-P. Doumerc, J. Solid State Chem. **110**, 419 (1994).

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА

Д.И. Гапич^{1*}, Д.И. Фролов¹, А.Н. Лавров¹, В.А. Кузнецов^{1,2}

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия*

*e-mail: dmitry.gapich@mail.ru

Открытие эффекта колоссального магнетосопротивления в манганатах и высокотемпературной сверхпроводимости в купратах вызвало появления множества работ, направленных на выяснение природы этих явлений. Вскоре было показано, что данные соединения обладают очень богатыми фазовыми диаграммами, обусловленными сильными электронными корреляциями за счет наличия зарядовых и решеточных степеней свободы [1,2]. В то же время, многообразие взаимодействий делает их очень трудными для понимания. Так, исследования расширились в сторону других оксидов переходных металлов, так как сравнение с похожими, но более простыми системами может дать ключ к пониманию поведения манганатов и купратов.

С данной точки зрения, в частности, интерес привлекают соединения $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+x}$, где R – редкоземельный элемент. Данное семейство обладает относительно простой слоистой кубической структурой и большим количеством различных переходов и упорядочений. В то же время, содержание кислорода можно изменять достаточно легко, с технологической точки зрения, что приводит к существенному изменению магнитных и электронных транспортных свойств. Это позволяет плавно менять степень легирования и непрерывно отслеживать изменения структуры и электронной подсистемы.

Несмотря на достаточно продолжительное время исследования данного семейства, в настоящее время в литературе отсутствуют комплексные исследования электронных транспортных свойств в широком диапазоне легирования кислородом. Например, для одного из наиболее исследованных составов $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ различные исследования дают противоречивую информацию о наличии и положении перехода металл-изолятор, его связи с изменением спиновых состояний ионов кобальта. Также, в литературе практически отсутствуют данные низкотемпературных зависимостей коэффициента термоЭДС для данного семейства в области малых содержаний кислорода ($x < 0,1$) в частности, и для соединения $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ в целом.

В настоящей работе представлено исследование температурных зависимостей коэффициента термоЭДС и электросопротивления поликристаллических образцов соединения $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ в широком диапазоне легирования кислородом. Выбор иттрия обусловлен, в том числе, отсутствием редкоземельного магнетизма, что отчасти облегчает наблюдаемую магнитную структуру. Кроме того, представленные в литературе аномалии температурных зависимостей коэффициента теплового расширения и электросопротивления данного соединения так и не нашли объяснения [3]. Было показано, что на температурных зависимостях электросопротивления и коэффициента термоЭДС для соединения $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5,000}$ видны переходы парамагнетик-антиферромагнетик и переход металл-изолятор, связанный с дальним цепочечным упорядочением ионов кобальта по степени окисления [4]. Поведение коэффициента термоЭДС в зависимости от степени легирования вблизи состава $x = 0,5$ значительно отличается от поведения соединений с другими редкоземельными металлами.

[1] M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998)

[2] E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo, Phys. Rep. **344**, 1 (2001)

[3] К.Р. Жданов, М.Ю. Каменева, Л.П. Козеева, Физика твердого тела **58**, № 8, 1522 (2016)

[4] T. Vogt, P.M. Woodward, P. Karen et al., Phys. Rev. Lett. **84**, № 13, 2969 (2000)

ВЗАИМОСВЯЗЬ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СЛОИСТЫХ КОБАЛЬТАТОВ $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$

Д.В. Побеленская^{1,2*}, Д.И. Гапич¹, Д.И. Фролов¹, А.Н. Лавров¹, В.А. Кузнецов^{1,2}

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия

*e-mail: pobelenskaya03@mail.ru

Слоистые кобальтаты $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ (R – редкоземельный металл) являются одними из наиболее простых для изучения представителей сложных оксидов, что позволяет использовать их в качестве модельной системы для исследования физических явлений, происходящих в более сложных представителях семейства оксидов переходных металлов. Кроме того, соединения $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ обладают достаточно большим термоэлектрическим откликом, что может дать дополнительную информацию для установления взаимосвязи электронного транспорта со спин-орбитальным вырождением и цепочечным упорядочением [1].

В настоящей работе были исследованы поликристаллические образцы $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$, которые были приготовлены из стехиометрической смеси Y_2O_3 , BaCO_3 и Co_3O_4 методом твердофазного синтеза. Для получения образцов с заданным, равновесным значением $x = 0$, и во избежание объемного градиента содержания кислорода время отжига образцов при 700°C в несколько раз превышало время кислородного обмена при данной температуре.

Для полученных образцов $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ при $x = 0$ были измерены температурные зависимости удельного электросопротивления $\rho(T)$ и коэффициента термоЭДС в диапазоне температур от 77,4 до 300 К, из анализа которых было выявлено изменение электрофизических свойств с течением времени выдержки образцов в инертной атмосфере.

В частности, с течением времени возрастает не только величина электросопротивления, но и угол наклона зависимостей $\rho(T)$ после перехода металл-диэлектрик (220 К) (рис. 1), а коэффициент термоЭДС стремится сменить знак. Причем, несмотря на продолжительное время выдержки образцов в инертной атмосфере электрофизические свойства соединения продолжают изменяться, что свидетельствует о длительных временах релаксации данных соединений.

Полученные сведения могут дать дополнительную информацию о структурных изменениях, происходящих в сильно коррелированных системах [2] с течением времени, и позволят в дальнейшем установить взаимосвязь релаксационных процессов и электрофизических свойств слоистых кобальтатов $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+x}$. В настоящее время информации о природе подобных изменений электрофизических свойств слоистых кобальтатов с течением времени в литературе не представлено.

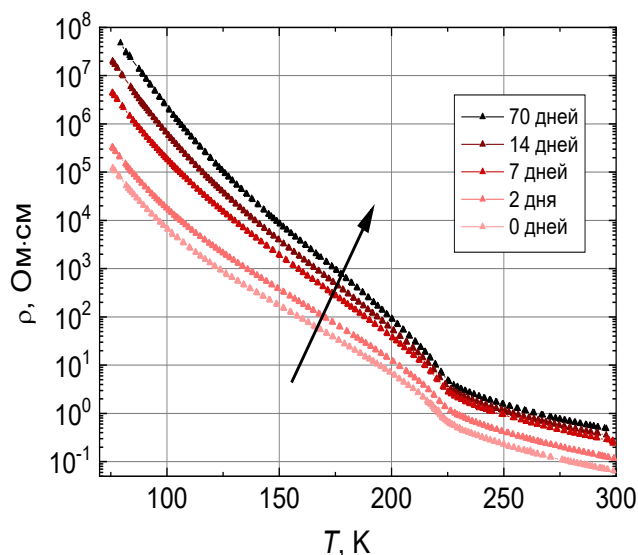


Рис. 1 Температурные зависимости электросопротивления образца YBaCo_2O_5 , измеренные через указанные промежутки времени после синтеза.

[1] A.A. Taskin, A.N. Lavrov, Y. Ando, Phys. Rev. B **71**, 134414 (2005)

[2] Dagotto E., Science **309**, 257 (2005)

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНО-МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР НА ИХ ЭФФЕКТИВНОСТЬ В ГИПЕРТЕРМИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЯХ

О.А. Гурова*, Е.В. Шляхова, А.В. Окотруб

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр-т ак. Лаврентьева, 3,
Новосибирск, Россия*

*e-mail: gurova@niic.nsc.ru

Углеродные наноструктуры (УНС) обладают уникальными физико-химическими свойствами, что обуславливает их широкое применение в биомедицинских технологиях. Среди ключевых направлений - целевая доставка фармацевтических агентов, регенеративная медицина, биосенсорика и методы селективной терапии злокачественных новообразований, такие как гипертермия. Способность УНС к эффективному поглощению ИК-излучения с последующей генерацией тепловой энергии позволяет использовать их для локального нагрева биологических структур. [1].

В данной работе использовались несколько типов УНС: многослойные углеродные нанотрубки (УНТ), синтезированные методом каталитического газофазного осаждения, коммерческие однослойные УНТ (TUBALL™) OCSiAl, и углеродные нанохорны, синтезированные методом электродугового синтеза. Для удаления углеродных «шапочек» образцы однослойных УНТ прокаливались при 500°C на воздухе. Удаление каталитического железа производилось с помощью комбинированного метода очистки с использованием соляной кислоты и магнитной сепарации [2]. Однослойные УНТ были заполнены неорганическими веществами с помощью ампульного метода [3]. Для создания устойчивых дисперсий в водных средах исходные УНС были окислены, а заполненные однослойные УНТ были диспергированы в воде с добавлением поверхностно-активного вещества (додецилсульфата натрия).

Морфология УНТ и нанохорнов была исследована с использованием сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, спектроскопией комбинационного рассеивания света, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией. Оптические и термические характеристики дисперсий всех образцов были исследованы в воде и физиологическом растворе.

Внедрение УНС в биологические ткани было осуществлено на личинках дрозофилы особей генотипа *hs-Gal4; UAS-GFP.nls* [4] путём введения углеродных образцов в питательную среду. Продemonстрировано способность УНС усиливать локальный разогрев препаратов личинок при облучении ИК-лазером.

[1] Alrahili M. «Light to heat conversion efficiency of single-walled carbon nanotubes» // Journal of Taibah University for Science. 2022. P. 923–932

[2] Gurova O.A., Arhipov V.E., Koroteev V.O., Guselnikova T.Ya., Asanov I.P., Sedelnikova O.V., Okotrub A.V. «Purification of single-wall carbon nanotubes using acid treatment and magnetic separation» // Phys. Status Solidi B. 2019.1800742

[3] Sedelnikova O.V., Gurova O.A., Makarova A.A., Fedorenko A.D., Nikolenko A.D., Plyusnin P.E., Arenal R., Bulusheva L.G., Okotrub A.V. «Light-Induced Sulfur Transport inside Single-Walled Carbon Nanotubes» // Nanomaterials 2020. 10(5). 818.

[4] Gurova O.A., Dubatolova T.D., Shlyakhova E.V., Omelyanchuk L.V., Okotrub A.V. «The hyperthermal effect of infrared irradiation on the CNT aqueous dispersions and CNT penetration in *Drosophila melanogaster* larvae» // Phys. Status Solidi B. 2018. 1700264

ВЗАИМОСВЯЗЬ МОРФОЛОГИИ И ТЕНЗОРЕЗИСТИВНЫХ СВОЙСТВ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

**А. А. Федоров^{1,2*}, Б. Ч. Холхоев³, В. Ф. Бурдуковский³, А. Ю. Ларичкин⁴,
В. Е. Колодезев⁴, В. Л. Кузнецов⁵, С. И. Мосеенков⁵, В. А. Кузнецов^{1,2}**

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия*

³*Байкальский институт природопользования СО РАН, 670047, Улан-Удэ, Россия*

⁴*Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

⁵*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

*e-mail: andrew_fedorov_1999@mail.ru

Ежегодно увеличивается число публикаций, посвященных созданию и исследованию новых полимерных композиционных материалов (ПКМ) для приложений гибкой электроники. В частности, большое количество работ направлено на создание сенсоров деформации в основе работы которых лежит тензорезистивный эффект. В качестве применения таких сенсоров в основном рассматривается носимая электроника для мониторинга здоровья человека и человеко-машинные интерфейсы. Для этих применений важна синергия таких параметров как широкий диапазон допустимых деформаций, быстрый отклик на механическое воздействие, высокий коэффициент тензочувствительности и устойчивость к многократному деформированию. Однако, в таких работах в первую очередь стремятся к достижению широкого диапазона деформаций, что часто приводит к большим гистерезисам электросопротивления и низкой циклоустойчивости, а также в этих работах не рассматриваются перспективы применения в нестандартных условиях, таких как повышенные или пониженные температуры и агрессивные среды.

Многократное измерение развитых деформаций при повышенных температурах является актуальной задачей в авиастроении, приборостроении и некоторых других отраслях промышленности. Для применений в этих областях ПКМ необходимо использовать теплостойкие термопластичные полимерные матрицы. В рамках данной работы были выбраны полимеры поли-2,2'-*n*-оксидифенилен-5,5'-добензимидазол (ОПБИ) и поли-*m*-фенилен-изофталамид (МПА), обладающие рекордными температурами стеклования для этого класса материалов. В качестве электропроводящего наполнителя были выбраны одностенные и многостенные углеродные нанотрубки (ОУНТ и МУНТ), поскольку они способны обеспечивать превосходную механическую связь с полимерной матрицей, гибкость и высокую электропроводность при их малом содержании. Были получены пленки ПКМ с содержанием нанотрубок в матрицах ОПБИ и МПА от 0,1 до 10 % (масс.).

Целью данной работы является установление взаимосвязи морфологии и тензорезистивных свойств теплостойких электропроводящих ПКМ в зависимости от типов использованных электропроводящих фаз и полимерных матриц. В рамках работы были исследованы тензорезистивные свойства в диапазоне температур от комнатной до 523 К, проанализированы температурные зависимости электросопротивления в диапазоне от 4,2 до 573 К, снимки электронной микроскопии, результаты динамического механического и термогравиметрического анализов. Показано, что полимерные матрицы с разной эффективностью разделяют углеродные нанотрубки, причем более сильное разделение наблюдается в случае ОПБИ. Использование ОУНТ в качестве электропроводящей фазы приводит к достаточно сильному гистерезису электросопротивления при исследовании тензорезистивных свойств, а при использовании МУНТ гистерезис минимален и зависимость коэффициента тензочувствительности от температуры отсутствует вплоть до 523 К.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-10223, <https://rscf.ru/project/24-79-10223/>.

**SNS-АНДРЕЕВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО
ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПНИКТИДА НЕДОДОПИРОВАННОГО СОСТАВА
 $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ С $x=0.07$**

А. Д. Ильина^{1*}, И. А. Никитченков^{1,2}, С. А. Кузьмичёв^{2,1}, К. С. Перваков¹,

В. А. Власенко¹, А. С. Медведев¹, Т. Е. Кузьмичёва¹

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева

²МГУ им. М.В. Ломоносова

*e-mail: anastasiailina2802@gmail.com

Исследованные поликристаллы $\text{BaFe}_{1.93}\text{Ni}_{0.07}\text{As}_2$ относятся к семейству железосодержащих сверхпроводников (СП) Ва-122, замечательными свойствами которых является умеренно высокая температура СП-перехода T_c (до 38 К), а также устойчивость на воздухе. В стехиометрическом составе ($x = 0$) BaFe_2As_2 температуры магнитного и структурного переходов из орторомбической решетки в тетрагональную совпадают $T_s \approx T_N \approx 138$ К. Переход в СП-состояние на фазовой диаграмме достигается при максимальной критической температуре $T_c \approx 20$ К, $x \approx 0.1$ [1]. На поверхности Ферми по результатам ФЭСУР присутствует дырочный цилиндр около Γ -точки зоны Бриллюэна и два вложенных электронных цилиндра в М-точках, каждая зона вносит вклад в сверхпроводимость ниже T_c [2].

Целью нашей работы было определение величин СП-щелей и их температурных зависимостей в поликристаллическом пниктиде номинального состава $\text{BaFe}_{1.93}\text{Ni}_{0.07}\text{As}_2$ методами спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (ЭНМАО), то есть исследовать вольтамперные характеристики (ВАХ) и спектры дифференциальной проводимости (ДП) планарных туннельных контактов типа SnS (S – СП, n – тонкий нормальный металл) высокой прозрачности в баллистическом режиме, создаваемых с помощью техники “break-junction” [3], а также исследовать температурную зависимость воспроизводимой особенности при смещениях $eV > 2\Delta_L$, предположительно, связанной с испусканием спинового экситона.

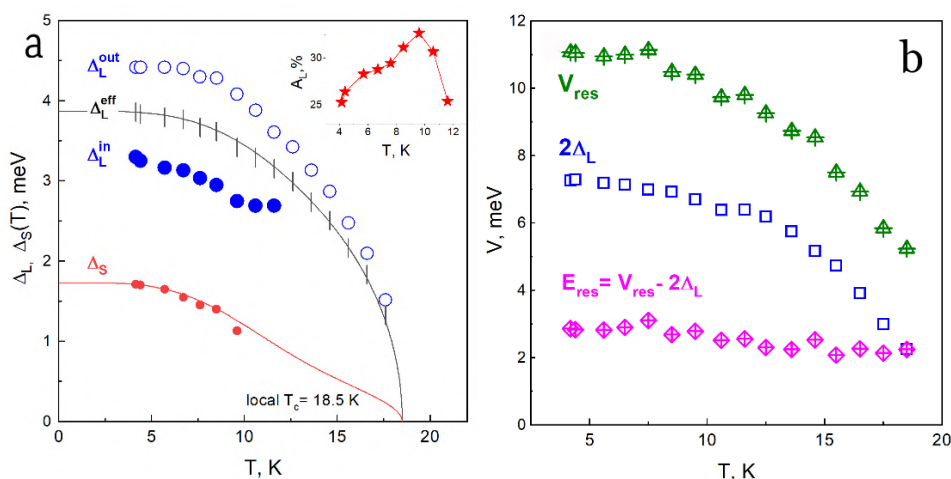


Рис 1. а) Температурные зависимости измеренных СП-щелей (кружки) и результат расчета $\Delta_L^{\text{eff}}(T)$ и $\Delta_S(T)$ в рамках двузонной модели Москаленко и Сула [5,6] показан сплошными линиями, б) температурная зависимость энергии бозонной моды $E_{\text{res}}(T)$, не повторяющая $\Delta_L(T)$.

Мы произвели анализ андреевских особенностей, наблюдаемых на $I(V)$ и $dI(V)/dV$ -характеристиках при $T = 4.2$ К, а также их температурной эволюции вплоть до T_c , исходя из

которого ниже T_c в $\text{BaFe}_{1.93}\text{Ni}_{0.07}\text{As}_2$ наблюдалась многощелевая сверхпроводимость. Определены экстремумы предположительно анизотропной большой СП-щели (наименьшее и наибольшее значение энергии связи куперовских пар в k -пространстве в данных зонах [7]) с характеристическими отношениями $2\Delta_L^{\text{in}}(0)/k_B T_c \approx 4$, $2\Delta_L^{\text{out}}(0)/k_B T_c \approx 5.5$ с параметром анизотропии $A_L = 100\% \cdot [1 - \Delta_L^{\text{in}}/\Delta_L^{\text{out}}]$, слабо зависящим от температуры $A_L(T) \approx 30 \pm 5\%$, что показано на вставке на Рис. 1(а). Также определена предположительно изотропная малая СП-щель с $2\Delta_S(0)/k_B T_c \approx 2$ [8]. Полученные величины и вид температурных зависимостей СП-щелей согласуются с полученными ранее данными для монокристаллов близкого состава [9] и представлен на Рис. 1(а). Таким образом, наблюдаемые на ДП-спектрах особенности не могут быть вызваны геометрическими резонансами или разориентацией СП-берегов контакта, а полученные энергетические величины соответствуют объемным СП-параметрам порядка.

Для анализа температурной эволюции трёх характерных энергий СП-спаривания, обнаруженных в данном соединении, была привлечена теоретическая двузонная модель Москаленко и Сула [5,6], где эффективная большая СП-щель определяется как $\Delta_L^{\text{eff}}(T) = (\Delta_L^{\text{out}}(T) + \Delta_L^{\text{in}}(T))/2$ и открывается на одной зоне, а малая СП-щель $\Delta_S(T)$ — на второй. В рамках модели Москаленко и Сула был произведен расчет температурных зависимостей СП-щелей, который представлен на Рис. 1(а) сплошными линиями и хорошо согласуются с экспериментальными данными. Определенные свободные параметры аппроксимации: локальная $T_c = 18.5\text{K}$, $\alpha = 5.3$, $\beta = 10.1$, рассчитана четверка перенормированных констант связи: $\lambda_{11} = 0.2956$, $\lambda_{22} = 0.2404$, $\lambda_{12} = 0.06076$, $\lambda_{21} = 0.01146$. Оценено умеренное межзонное взаимодействие в k -пространстве между двумя эффективными СП-конденсатами.

Помимо щелевых особенностей, ниже T_c на ДП-спектрах мы наблюдали тонкую структуру при $|eV| = [2\Delta + E_{\text{res}}]/n$, связанную, предположительно, с испусканием бозона в процессе ЭНМАО. Впервые для недодопированных $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ определена энергия бозона $E_{\text{res}}(0) \approx 4.3$ мэВ и ее температурная зависимость. Как видно из Рис. 1(б), с увеличением температуры $E_{\text{res}}(T)$ слабо убывает, не повторяя зависимость $\Delta_L(T)$, однако схоже с поведением энергии спин-резонансного пика в железосодержащих СП [10]. Характеристическое отношение энергии бозона $E_{\text{res}}/k_B T_c \approx 2.7$ находится вблизи нижней границы диапазона значений, полученных ранее в оксипниктидах системы 1111 [11]. Таким образом, наблюдаемый бозонный резонанс при смещении eV_{res} может быть спиновым экситоном.

- [1] X. Lu, J.T. Park, R. Zhang, H. Luo, A.H. Nevidomskyy, Q. Si, P. Dai, Phys. Rev. Lett. **110**, 257001 (2013).
- [2] S. Ideta, T. Yoshida, I. Nishi, A. Fujimori, A. Kotani, K. Ono, R. Arita, Phys. Rev. Lett. **110**, 107007 (2013).
- [3] S.A. Kuzmichev, T.E. Kuzmicheva, Low Temp. Phys. **42**, 1008 (2016).
- [4] U. Günsenheimer, A.D. Zaikin, Phys. Rev. B **50**, 6317 (1994)
- [5] V.A. Moskalenko, Phys. Met. Metallogr. **8**, 25 (1959).
- [6] H. Suhl, B.T. Matthias, L.R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
- [7] R. Kuemmel, Phys. Rev. B **42**, 3992 (1990).
- [8] T.P. Devereaux, P. Fulde, Phys. Rev. B **47**, 14638(R) (1993).
- [9] A.V. Sadakov, S.A. Kuzmichev, T.E. Kuzmicheva, V.M. Pudalov, JETP Lett. **116**, 686 (2022).
- [10] M.M. Korshunov, D.V. Efremov, O.V. Dolgov, Phys. Rev. B **94**, 094517 (2016).
- [11] S.A. Kuzmichev, T.E. Kuzmicheva, A.V. Sadakov, V.M. Pudalov, EPL **119**, 17007 (2017).

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛАЗЕРНОГО НАПЫЛЕНИЯ YBCO ПЛЁНОК ТЕНЕВЫМ МЕТОДОМ

А.В. Дуранова, Г.М. Серопян*

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077, Омск, Россия

*e-mail: ser_gm@mail.ru

Проведено исследование зарождения и роста тонких пленок YBCO, выращиваемых методом теневой лазерной абляции. Методом атомно-силовой микроскопии изучено образование и рост отдельных кристаллитов. Установлено, что увеличение интенсивности лазерного излучения приводит к уменьшению среднего размера формирующихся частиц. Это объясняется переходом от термического испарения к «взрывной» абляции и более эффективным увлечением мелких частиц газодинамическим потоком.

Ключевые слова: высокотемпературная сверхпроводимость, тонкие пленки, лазерная абляция, теневое напыление, атомно-силовая микроскопия, морфология поверхности.

Высокотемпературные сверхпроводящие (ВТСП) пленки на основе $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (YBCO) являются ключевым материалом для перспективных применений в электроэнергетике, в получении сильных магнитных полей и для создания и разработки сверхчувствительных датчиков [1, 2]. Метод лазерной абляции является одним из наиболее эффективных для выращивания сверхпроводящих пленок. Однако при геометрии прямого напыления на поверхности пленки оседают капли материала мишени, ухудшающие качество плёнки [3, 4]. Альтернативой является метод теневого лазерного напыления, этот метод позволяет исключить попадание крупных частиц распыляемого материала на подложку.

Напыление пленок проводили с помощью твердотельного импульсного Nd:YAG лазера с длиной волны излучения 1064 нм, длительностью импульса 16 нс, частотой импульсов 10 Гц. Давление в напылительной камере составляло 100 Па, расстояние от мишени до подложки – 3 см, температура подложки – 820 °С. Для исследования начальной стадии роста напыление проводили в течение 5 секунд. Были приготовлены два образца с разной интенсивностью лазерного излучения: образец №1 – $1,4 \cdot 10^{11}$ Вт/см², образец №2 – $3,1 \cdot 10^9$ Вт/см².

Методом атомно-силовой микроскопии были получены изображения поверхности образцов (рис. 1 и 2).

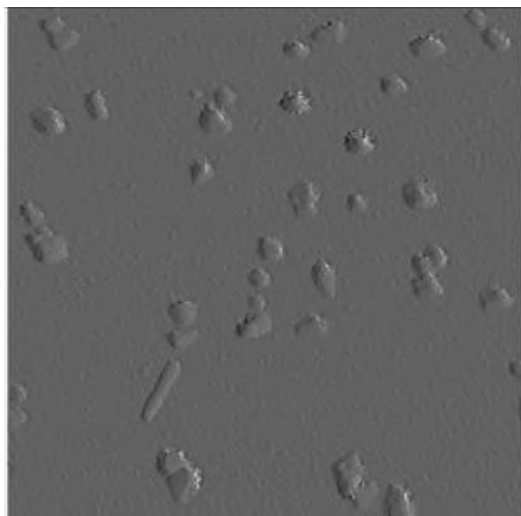


Рис. 1. АСМ изображение частиц YBCO образца №1

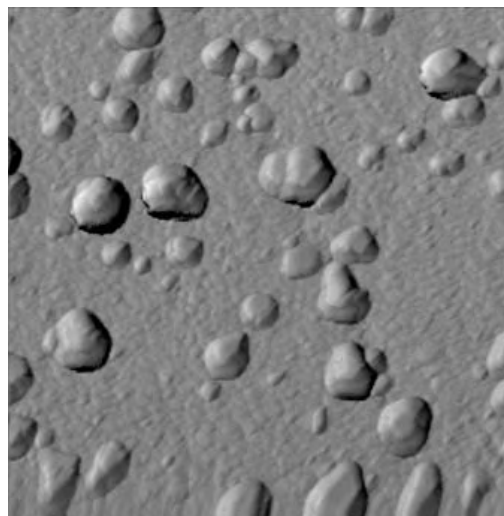


Рис. 2. АСМ изображение частиц YBCO образца №2

На поверхности формируются немногочисленные, но крупные островки размером в сотни нанометров. Частицы имеют выраженную кристаллическую форму, близкую к пирамидальной, кристаллиты ориентированы в разных направлениях. Наблюдается эффект коагуляции: области вокруг крупных частиц обеднены мелкими, что указывает на их слияние на ранней стадии роста.

Сравнительный анализ образцов, полученных при разной интенсивности лазерного излучения, выявил существенные различия. Для образца №2 характерно меньшее количество, но в среднем более крупные островки. Для образца №1 наблюдается большее количество частиц меньшего размера. Гистограммы распределения частиц по размерам приведены на рис. 3 и 4.

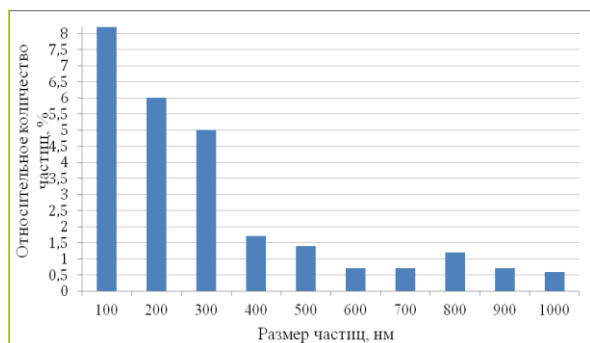


Рис. 3. Распределение частиц при интенсивности $1,4 \cdot 10^{11}$ Вт/см², образец №1

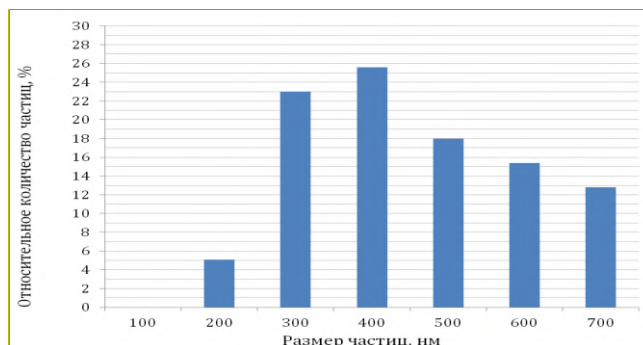


Рис. 4. Распределение частиц при интенсивности $3,1 \cdot 10^9$ Вт/см², образец №2

Гистограммы показывают, что с ростом интенсивности доля мелких островков до 100 нм возрастает. При увеличении интенсивности излучения наблюдается уменьшение среднего размера формирующихся на подложке островков. При низкой интенсивности ($\sim 10^9$ Вт/см²) преобладает термическое испарение материала мишени с образованием крупных капель расплава. Их высокая масса и инерция не позволяют эффективно огибать препятствие, поэтому на рабочую поверхность подложки попадает в основном парогазовая фаза из мелких частиц, конденсирующаяся затем в виде крупных островков. В диапазоне 10^9 – 10^{11} Вт/см² происходит переход к «взрывной абляции» с образованием мелких наночастиц, материал мишени дробится на мелкие наночастицы и ионные кластеры, мелкие частицы легче увлекаются плазменным потоком и газом, поэтому эффективнее огибают подложку.

- [1] S.R. Foltyn, M.E. Glicksman. Materials science challenges for high-temperature superconducting wire. *Nature Materials*, 2007, с. 631–642.
- [2] Л. Гусева. Высокотемпературные сверхпроводники. Перспективы использования в СВЧ-компонентах. *Электроника НТБ*, 1999, №2, с. 1–2.
- [3] А.И. Ильин, О.В. Трофимов, А.А. Иванов. Связь морфологии поверхности тонких плёнок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, полученных импульсным лазерным напылением, с температурой окончания сверхпроводящего перехода. *Физика твёрдого тела*, 2020, т. 62, № 9 (91347), с. 1555–1561.
- [4] С.И. Красносвободцев, А.Г. Маресов, А.Н. Образцов, В.Г. Пирогов, О.В. Снигирев. Влияние параметров YBCO плёнок на свойства ВТСП ПТ сквидов. *Журнал технической физики*, 1995, т. 65, № 2, с. 87–94.

РАЗРАБОТКА ЭЛЕМЕНТОВ ЭЛЕКТРОНИКИ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

В.А. Кузнецов^{1,2}

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, Россия*

*e-mail: vitalii.a.kuznetsov@gmail.com

Разработка новых элементов электроники на основе новых материалов всегда сопряжена с необходимостью проведения ряда поисковых исследований. Так, для создания элементов на основе полимерных электропроводящих композиционных материалов требуется провести комплекс работ, направленных на установление взаимосвязи состав композита – свойство. А именно, установить влияние типов электропроводящего наполнителя и полимерной матрицы на морфологию конечного композиционного материала и его электрофизические свойства. Наиболее перспективными электропроводящими наполнителями для создания полимерных композиционных материалов являются углеродные наноструктурированные материалы, такие как углеродные одностенные и многостенные нанотрубки, графитовые наночастицы, графеновые частицы, частицы различных производных графена. При этом в зависимости от типа наполнителя и типа полимерной матрицы будет зависеть характер взаимодействия между ними, а это может существенно изменять морфологию конечного композиционного материала. Различные тип углеродных наночастиц и морфология композитов определяют конечные не только физико-механические, но и электрофизические свойства материала, что определяет необходимость проведения широкого спектра исследований.

В рамках настоящей работы представлен комплекс экспериментальных данных по исследованию электрофизических свойств и морфологических особенностей полимерных композиционных материалов, полученных с использованием различных полимеров, таких как полибензимидазол и ароматический полиамид, и различных наполнителей, одностенных и многостенных углеродных нанотрубок и графитовых наночастиц. Приводятся результаты исследования электронных транспортных свойств (температурные зависимости электросопротивления и коэффициента термоЭДС, измеренные в условиях инертной атмосферы, атмосферы воздуха и в условиях высокого вакуума в диапазоне температур от криогенных до 300°C), спектроскопических свойств (ИК-, КР- и фотолюминесцентная спектроскопия), физико-механических и тензорезистивных свойств. Полученные результаты позволяют не только установить морфологические особенности разработанных композитов, но и определить дальнейшие направления по разработке эффективных функциональных полимерных композиционных электропроводящих элементов для электроники. Так, например, показано, что композиты, полученные с использованием гибких по своей природе наночастиц наполнителя, проявляют необратимые тензорезистивные свойства, то есть после деформации образца композита, возвращения деформации к нулевому значению, его электросопротивление к исходному значению не возвращается. Или, другой пример – величина коэффициента термоЭДС композиционного материала зависит не только от типа полимерной матрицы и типа наполнителя, но и от его постсинтетической термической обработки, такой, например, как отжиг в кислородсодержащей атмосфере или в условиях высокого вакуума. Данный эффект изменения коэффициента термоЭДС связан с перераспределением по составу легирующих примесей на поверхности углеродных нанотрубок, роль которых выполняют кислородные группы, являющиеся акцепторными поверхностными состояниями.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-10223, <https://rscf.ru/project/24-79-10223/>.

ПОЛЯРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ОБМЕННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ КОРРЕЛИРОВАННОЙ PD-СИСТЕМЫ

А.В. Дударев^{1,2*}, Е.И. Шнейдер¹, С.В. Николаев^{1,3}

¹*Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия*

²*Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева, 660037, Красноярск, Россия*

³*Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия*

*e-mail: aleksdudarev2013@gmail.com

Взаимодействие электронов с колебаниями кристаллической решётки — одно из основных направлений теории конденсированного состояния вещества. При определенных условиях электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ) приводит к формированию поляронов или биполяронов [1]. В системах с сильными электронными корреляциями (СЭК) их свойства могут существенно отличаться от тех, что ожидаются для одноэлектронных систем. Это открывает путь к нахождению новых, ранее неизвестных эффектов. Задача осложняется тем, что в коррелированных системах приближение свободных электронов неприменимо, поскольку поведение носителей заряда определяется сложным переплетением электронных и решёточных степеней свободы.

Поляронные эффекты лежат в основе целого ряда фундаментальных процессов, определяющих электронную структуру, транспортные свойства и магнитные характеристики широкого класса материалов. К ним относятся, в частности, высокотемпературные сверхпроводники на основе оксидов меди, соединения переходных металлов и органические полупроводники.

Для анализа поляронных эффектов в обменном взаимодействии электрон-коррелированной системы с сильным ЭФВ рассмотрена *pd*-модель, дополненная учётом локальных и нелокальных в узельном представлении электрон-решеточных вкладов:

$$H = H_{pd} + H_{epi}(\lambda_H, \lambda_P)$$

где H_{pd} — электронная *pd*-модель;

$H_{epi}(\lambda_H, \lambda_P)$ — электрон-фононный вклад в виде механизмов Хольштейна λ_H и Пайерлса λ_P .

Для корректного учета многочастичных эффектов расширенная *pd*-модель была переписана в представлении операторов Хаббарда с помощью метода обобщённой сильной связи [2]. Это позволило далее выполнить проектирование [3, 4] исходной модели на эффективную однозонную модель и получить выражение для параметра обменного взаимодействия с учетом поляронных эффектов:

$$J_{gg'}^{eff} = \frac{\left(2t^{pd} \mu_{gg'} \left(\gamma_{d,g}^* (0, \sigma) \gamma_{b,g'} (\bar{\sigma}, 2) + \gamma_{b,g}^* (0, \sigma) \gamma_{d,g'} (\bar{\sigma}, 2) \right) + 4t^{pp} \nu_{gg'} \gamma_{b,g}^* (0, \sigma) \gamma_{b,g'} (\bar{\sigma}, 2) \right)^2}{\varepsilon_0 + \varepsilon_2 - 2\varepsilon_1},$$

где t^{pd} и t^{pp} — энергии перескоков между орбиталями *pd* и *pp* соответственно; $\mu_{gg'}$, $\nu_{gg'}$ — функции Ванье для узлов g и g' ; ε_0 , ε_1 , ε_2 — одноузельные энергии нуль, одно, двух-частичных состояний; $\gamma_{\alpha,g}^*(p, q)$ — матричный элемент перехода между квазичастичными состояниями q и p , α — орбитальный индекс.

Были вычислены величины обменного взаимодействия для различных значений параметров электрон-решёточной связи (табл. 1) с параметрами электронной структуры,

соответствующими соединению La_2CuO_4 : в случае отсутствия ЭФВ (чисто электронная pd -модель), при слабом ЭФВ без учёта возбужденных поляронных состояний, а также в режиме сильного ЭФВ, соответствующего формированию коррелированного решеточного полярона.

Таблица 1 – Значения эффективного обменного взаимодействия J_{eff} и отдельные вклады J_{pp} и J_{pd} , обусловленные переходами между орбиталями $p-p$ или $p-d$ в зависимости от параметров ЭФВ типа Хольштейна и Пайерлса

	Без учета ЭФВ $\lambda_H = 0, \lambda_P = 0$	слабое ЭФВ $\lambda_H = 0.2, \lambda_P = 0.02$	сильное ЭФВ $\lambda_H = 1.2, \lambda_P = 0.2$
J_{pp} , эВ	0,13	0,05	$1,3 \cdot 10^{-7}$
J_{pd} , эВ	0,06	0,02	$9 \cdot 10^{-8}$
J_{eff} , эВ	0,37	0,15	$4,5 \cdot 10^{-6}$

Как видно, эффективное обменное взаимодействие подавляется по мере усиления ЭФВ типа Хольштейна и в области коррелированного решеточного полярона, где электронная структура демонстрирует частично плоскую поляронную зону [5], становится практически нулевым. Этот результат соответствует предсказаниям Кугеля и Хомского [6] об экспоненциальном подавлении обменного взаимодействия в случае, когда решётка успевает релаксировать между электронными переходами.

Однако недавние исследования показали, что в некоторых случаях наблюдается иной результат. Добавление ЭФВ типа Пайерлса привело к усилению параметра обменного взаимодействия и, как следствие, усилению антиферромагнитного порядка [7]. Для исследования этого факта была рассмотрена эволюция обменного взаимодействия в зависимости от параметров ЭФВ типа Хольштейна и Пайерлса, результаты показаны на рисунке 1. Видно, что существует область фазовой диаграммы, для которой происходит усиление эффективного обменного взаимодействия, например, $\lambda_H = 0,2$; $\lambda_H = 0,4$; $\lambda_H = 0,6$; $\lambda_H = 0,8$; $\lambda_H = 1,0$, $\lambda_H = 1,2$ для $\lambda_P < 0,15$.

Полученные результаты подчёркивают конкуренцию локальных и нелокальных механизмов ЭФВ и указывают на необходимость дальнейших исследований.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ № 24-12-00044).

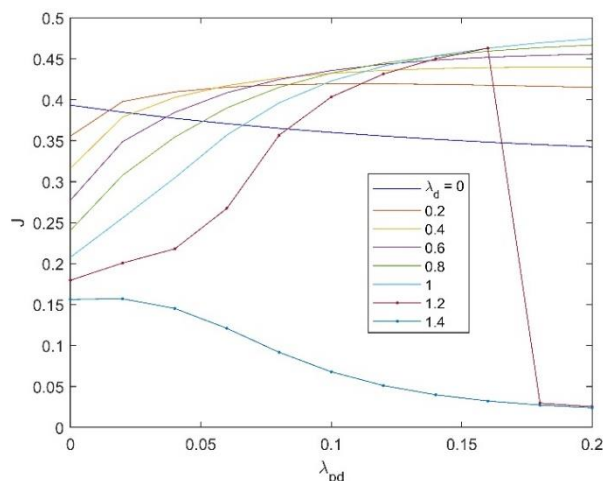


Рисунок 1 - График зависимости значений обменного взаимодействия J (в эВ) от параметров ЭФВ типа Хольштейна и Пайерлса λ_H, λ_P .

- [1] A.S. Alexandrov, J. Ranninger, Phys. Rev. B **23**, 1796 (1981)
- [2] I. A. Makarov, et al., Phys. Rev. B **92** 155143 (2015)
- [3] K. A. Chao, J Spalek, A. M. Oles J. Phys. C: Solid State Phys. **10** L271, (1977)
- [4] V. A. Gavrichkov et al., Phys. Rev. B **95** 144424 (2017)
- [5] E. I. Shneyder, et al., Phys. Rev. B **101**, 235114 (2020)
- [6] K.I. Kugel, D.I. Khomskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **79**(3), 987-1005 (1980)
- [7] C. Xun, L. Zi-Xiang, Y. Hong, Phys. Rev. Lett. **127**, 247203 (2021)

ОДНО- И ДВУХЧАСТИЧНЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ В КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

В.И. Кузьмин¹, С.В. Николаев^{1,2*}, М.М. Коршунов^{1,2}, С.Г. Овчинников^{1,2}

¹*Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия*

²*Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия*

*e-mail: svinikolaev@sfu-kras.ru

В коррелированных материалах электронная и магнитная подсистемы сильно связаны между собой. Классическими примерами являются высокотемпературные сверхпроводники, фазовая диаграмма которых содержит антиферромагнитные (AFM), металлические, состояния волны зарядовой плотности и псевдощелевые состояния. Например, в купратах исследования резонансного неупругого рентгеновского рассеяния (RIXS) выявили магноноподобные возбуждения в широком диапазоне допирования. При этом импульсно-зависимые зарядовые возбуждения наблюдались в RIXS в псевдощелевой фазе купратов. Динамика спина и заряда связана с зависимыми от допирования изменениями в электронной структуре, наблюдаемыми в экспериментах фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES). Электронные возбуждения можно описать одночастичными функциями Грина, а расчет магнитных и зарядовых возбуждений основан на двухчастичных функциях отклика. Двухчастичные корреляционные функции предоставляют важную информацию об упорядоченных фазах сильно коррелированной системы.

В данной работе представлены зависимости электронной структуры и спиновой восприимчивости от допирования, полученные в рамках кластерной теории возмущений (СРТ) [1-3]. Изменение восприимчивости при увеличении допирования качественно соответствуют экспериментальным данным по резонансному неупругому рентгеновскому рассеянию и неупругому рассеянию нейтронов.

Для расчета динамической спиновой восприимчивости был предложен новый подход spin-СРТ, который основан на расчете корреляционных функций с помощью точной диагонализации с последующим вычислением двухчастичной спектральной решеточной функции способом, подобным стандартному СРТ. В частности, было показано, что spin-СРТ дает низкоэнергетический отклик при четырех несоизмеримых волновых векторах, что качественно согласуется с результатами неупругого рассеяния нейтронов на передопированных купратах. Также в широком диапазоне допирования было получено распределение спектральной интенсивности, напоминающее верхнюю ветвь экспериментально наблюдаемой дисперсии в виде песочных часов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 24-12-00044).

- [1] V.I. Kuz'min, S.V. Nikolaev, M.M. Korshunov, S.G. Ovchinnikov, *Materials* **16**, 4640 (2023).
- [2] В.И.Кузьмин, М.М. Коршунов, С.В. Николаев, Т.М. Овчинникова, С.Г. Овчинников, *Письма в ЖЭТФ* **120**, 45 (2024).
- [3] S.G.Ovchinnikov, V.I.Kuz'min, S.V. Nikolaev, M.M. Korshunov, *JSNM* **37**, 2023 (2024).

ИССЛЕДОВАНИЕ СИНТЕЗА СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ SMBASUO

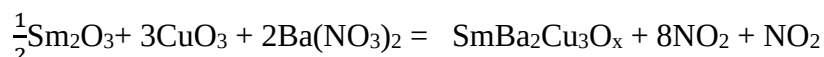
С.А. Сычев, Д.В. Федосов, Г.М. Серопян*

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077, Омск, Россия

*e-mail: ser_gm@mail.ru

Актуальность работы заключается в том, что методы получения высокотемпературных сверхпроводящих материалов с высокими показателями сверхпроводящих параметров все еще не до конца изучены [1, 2].

Для успешного проведения синтеза был проведен расчет соотношения реагентов по реакции:



Полученная смесь реагентов отжигалась по разным термическим режимам с целью синтеза сверхпроводника, обладающего полным сверхпроводящим переходом при температурах выше температуры кипения жидкого азота (77,4К).

Измерения критической температуры и ширины сверхпроводящего перехода четырехзондовым методом дали результаты, приведенные на рис.1 и рис.3.

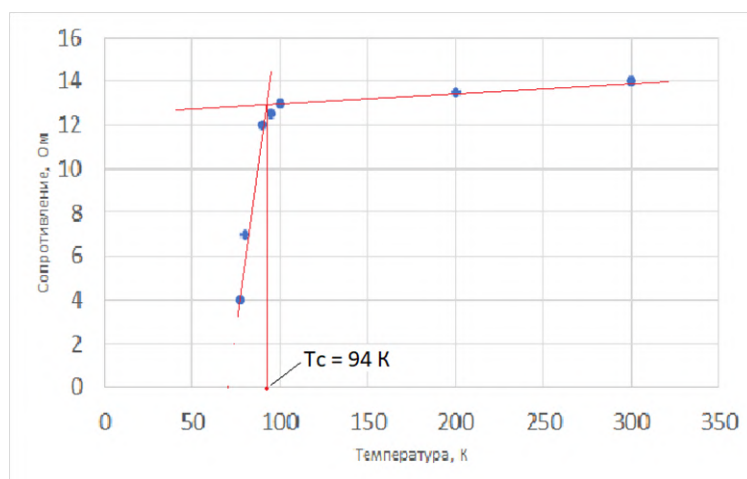


Рис. 1. График перехода образца в СП состояние (образец №1).
Отжиг 940 °С с выдержкой 12 часов.

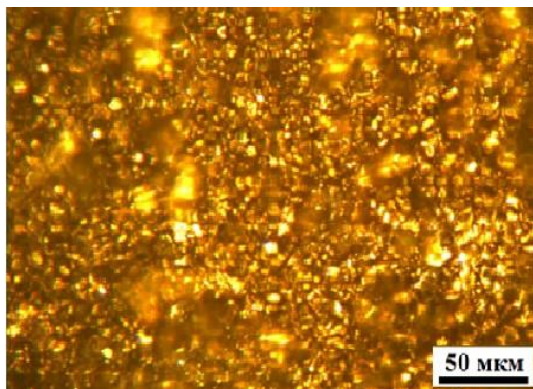


Рис. 2. Микрофотография поверхности Sm-123 (образец №1).

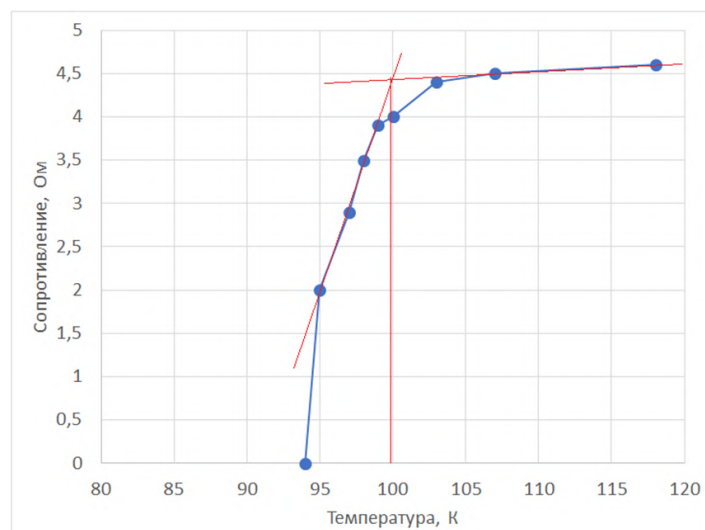


Рис.3. Сверхпроводящий переход керамики Sm-123 (образец №2).
Отжиг 960⁰С с той же выдержкой 12 часов.

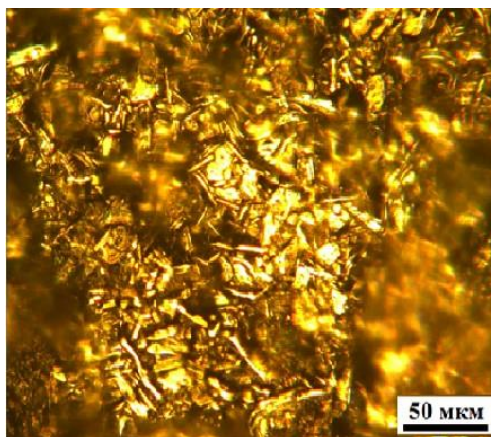


Рис.4. Микрофотография поверхности Sm-123 (образец №2).

Анализ микрофотографий показал, что режим отжига образца №1 не приводит к образованию крупных кристаллитов (рис. 2). Отсутствие полного перехода в СП состояние при температуре кипения жидкого азота указывает на образование множества несверхпроводящих фаз. Размеры кристаллитов составляют 1-5 мкм. При температуре отжиг 960⁰С с той же выдержкой 12 часов наблюдается полный переход в СП состояние, а размеры кристаллитов составляют десятки микрон. Взаимосвязь размера кристаллитов со сверхпроводящими параметрами поликристаллической керамики требует дальнейшего изучения.

[1] М.И. Баранов. Антология выдающихся достижений в науке и технике. Часть 10. Открытие и изучение сверхпроводимости материалов. Электротехника и электромеханика, 2012, №5, с. 3-12.

[2] И.А. Паринов. Микроструктура и свойства высокотемпературных сверхпроводников. Ростов на Дону: изд-во РГУ, 2004, 416 с.

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В МНОГОЗОННОЙ МОДЕЛИ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СОЕДИНЕНИЙ ЖЕЛЕЗА ДЛЯ РЕАЛИСТИЧНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ

Е.А. Ларионов^{1,2*}, М.М. Коршунов¹

¹Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

²ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

*e-mail: egor.larionov_rp@mail.ru

Интерес к высокотемпературной сверхпроводимости в соединениях железа определяется как практическим применением исследуемых соединений, так и наличием нерешенных проблем, связанных с описанием таких систем. Одной из таких проблем является отсутствие в расчетах в рамках теории функционала плотности дополнительных контуров Ферми в дырочно-допированных соединениях железа, но присутствие их в эксперименте, см. Рис. 1. В работе представлен анализ влияния дополнительных элементов ферми-поверхности на симметрию сверхпроводящего состояния. Расчет был сделан в реалистичной десятиорбитальной модели из работы [1]. Параметры модели подбирались для получения поверхности Ферми, повторяющей экспериментально наблюдаемую из работы [2]. Восприимчивость $\chi(q, \omega)$ вычислялась как спиновый коррелятор в приближении случайных фаз (RPA) с учётом многоробитального одноузельного кулоновского взаимодействия, параметры которого включали внутриорбитальное и межорбитальное хаббардовское отталкивание U и U' , хундовский обмен J и межорбитальный перескок J' [3]. Рассчитана куперовская вершина и решено уравнение на сверхпроводящую щель. Обсуждается роль дополнительных ферми-контуров в формировании восприимчивости и сверхпроводящего состояния.

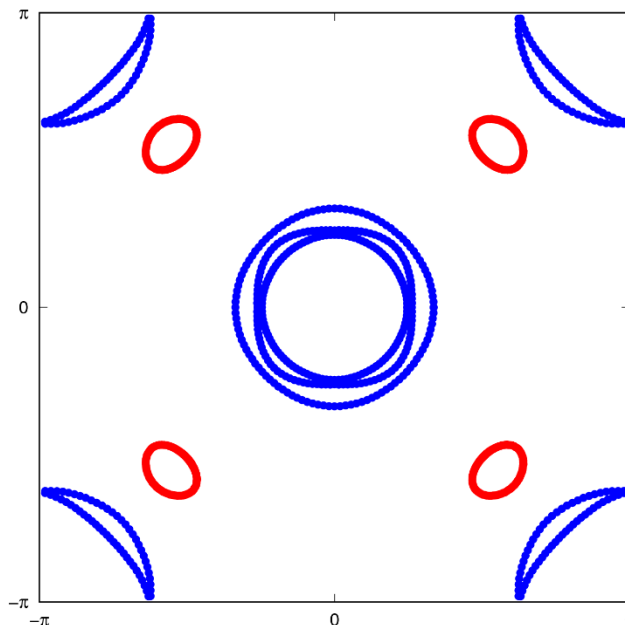


Рис 1. Ферми-поверхность дырочно-допированного соединения железа. Красным отмечены дополнительные ферми-контур

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-20043, <https://rscf.ru/project/25-22-20043/>, гранта Красноярского краевого фонда науки.

[1] H. Eschrig, K. Koepernik, Physical Review B **80**, 104503 (2009)

[2] A.A. Kordyuk, V.B. Zabolotnyy, D.V. Evtushinsky, A.N. Yaresko, B. Büchner, S.V. Borisenko, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism **26**, 2837 (2013)

[3] М.М. Коршунов, УФН **184**, 882–888 (2014)

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА МОНОСЛОЯ CuO В ПАРАМАГНИТНОЙ ФАЗЕ С УЧЕТОМ КУЛОНОВСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

И.А. Макаров^{1,*}, А.А. Слободчиков², И.А. Некрасов^{2,3}, Ю.С. Орлов¹, Л.В. Бегунович⁴, М.М. Коршунов¹, С.Г. Овчинников¹,

¹Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

²Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, 620016, Екатеринбург, Россия

³Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук, 119991, Москва, Россия

⁴Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», 660036, Красноярск, Россия

*e-mail: maki@iph.krasn.ru

Считается, что основные свойства ВТСП-купратов формируются в CuO₂-плоскостях. В работах [1] был синтезирован другой тип медно-кислородных слоёв – монослой CuO. Анализ свойств монослоёв CuO может прояснить природу процессов, происходящих в CuO₂-плоскостях ВТСП-купратов в силу значительного сходства этих двух систем, а также привести к открытию его уникальных свойств.

В данной работе электронная структура монослоя CuO исследуется с учётом внутри- и межатомных кулоновских взаимодействий на атомах меди и кислорода, поскольку сильные электронные корреляции (СЭК) могут играть важную роль в этих соединениях. Электронная система монослоя CuO описывается в рамках восьмизонной *p-d*-модели, построенной на основе $d_{x^2-y^2}$, $d_{3z^2-r^2}$, d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} -орбиталей меди и p_x -, p_y -, p_z -орбиталей кислорода. Гамильтониан учитывает перескоки до четвёртых ближайших соседей, энергии и интегралы перескоков получены в расчётах *ab initio*. Учитываются пять типов кулоновских взаимодействий: внутриатомные внутриорбитальное U_d , межорбитальное V_d и хундовское обменное J_d на атомах меди, внутриатомное на кислород U_p и межатомные взаимодействия между атомами меди и кислорода V_{pd} . В данной работе мы будем варьировать кулоновские параметры для исследования всех возможных типов электронной структуры, которые могут существовать в монослое CuO. Для учета многочастичных эффектов и СЭК используется обобщенный метод сильной связи (ГТВ) [2]. В этом методе электронная структура формируется квазичастичными возбуждениями между многочастичными собственными состояниями кластера, на которые разбита вся кристаллическая решетка. Для ортогонализации состояний кислорода в соседних кластерах CuO было проведено обобщение процедуры Шастри [3] для трех орбиталей. Атомные орбитали кислорода p_x , p_y , p_z были заменены молекулярными орбиталями α , β , γ . Для работы с собственными состояниями кластера удобно использовать дырочное представление на фоне полностью заполненных электронами *d*- и *p*-оболочек меди и кислорода. В дырочном представлении энергия локального состояния с незанятой орбиталью λ (или одной дыркой) определяется как энергия полностью заполненных оболочек ϵ_0 , уменьшенная на локальную энергию ϵ_λ электрона, удаленного с соответствующей орбитали λ вместе со всеми взаимодействиями U' , в которых он участвует. Это хорошо видно из локальной части гамильтониана (без гибридизации с другими орбиталями и без учета кулоновских взаимодействий), связанной с орбиталью λ на узле **f** [4]:

$$H_{f\lambda}^{(h)} = \epsilon_0 - (\epsilon_\lambda + U') h_{\lambda f}^\dagger h_{\lambda f}, \quad (1)$$

где $h_{\lambda f\sigma}$ - оператор уничтожения дырки, $h_{\lambda f\sigma} = c_{\lambda f\sigma}^\dagger$ ($c_{\lambda f\sigma}^\dagger$ - оператор рождения электрона).

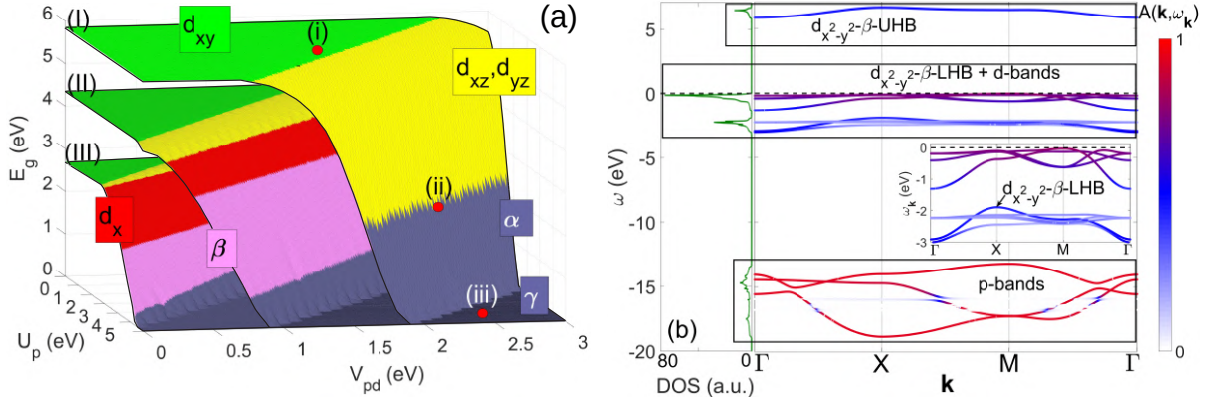


Рис. 1. (a) Зависимость величины диэлектрической щели E_g для монослоя CuO от параметров U_p и V_{pd} для трех фиксированных наборов: (I) $U_d = 9$, $V_d = 7$, $J_d = 1$; (II) $U_d = 6$, $V_d = 5$, $J_d = 0.5$; (III) $U_d = 4$, $V_d = 3.2$, $J_d = 0.4$ эВ. Одноцветные участки поверхностей с меткой орбитали показывают области кулоновских параметров, в которых данная орбиталь вносит преимущественный вклад в состояния на потолке валентной зоны. Точки (i), (ii) и (iii) показывают значения параметров U_p и V_{pd} , для которых будет обсуждаться зонная структура. (b) Зонная структура и плотность состояний (DOS) квазичастичных возбуждений монослоя CuO при $U_d = 9$, $V_d = 7$, $J_d = 1$, $U_p = 3$, $V_{pd} = 1.5$ эВ.

Электронная структура рассчитана в рамках многозонной модели Хаббарда методом уравнений движения для функций Грина, построенных на операторах Хаббарда, описывающих квазичастичные возбуждения. В отсутствие кулоновского взаимодействия состояния на уровне Ферми образованы медными $d_{x^2-y^2}$ - и кислородными β -орбиталями. При учете кулоновского взаимодействия диэлектрическая щель открывается между верхней и нижней зонами Хаббарда $d_{x^2-y^2}$ - и β -орбиталей. Рассчитаны величина диэлектрической щели и тип орбиталей, вносящих наибольший вклад в спектральный вес в верхней части валентной зоны в пространстве параметров U_p и V_{pd} (Рис. 1a). При малых U_p и V_{pd} образуется большая щель между d- и p-состояниями, потолок валентной зоны образуют d_{xy} -состояния (Рис. 1a, зеленое плато у поверхности (I)), p-состояния лежат глубоко внутри валентной зоны (Рис. 1b), их гибридизация с d-состояниями мала. Кислородные p-зоны с ростом взаимодействий U_p и V_{pd} поднимаются к потолку валентной зоны, их гибридизация с d-состояниями становится значительной, состояния на потолке валентной зоны приобретают характер смешанных rd-состояний ($d_{x^2-y^2}$ - β - и d_{xz} - d_{yz} - α - γ -зоны, Рис. 1a, желтая и темно-синяя области), величина диэлектрической щели уменьшается. При дальнейшем увеличении взаимодействий U_p и V_{pd} вклад p-состояний кислорода вблизи уровня Ферми становится преобладающим, и диэлектрическая щель закрывается (Рис. 1a, темно-синяя область), что приводит к формированию металлического состояния.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-20043, <https://rscf.ru/project/25-22-20043/>, гранта Красноярского краевого фонда науки.

- [1] E. Kano et al., *Nanoscale* **9**, 3980 (2017); K. Yin et al., *2D Mater.* **4**, 011001 (2017); D. G. Kvashnin et al., *J. Phys. Chem. C* **123**, 17459 (2019).
- [2] S. G. Ovchinnikov and I. S. Sandalov, *Physica C* **161**, 607 (1989).
- [3] B. S. Shastry, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1288 (1989).
- [4] И. А. Макаров и др., *ЖЭТФ* **167**, 685 (2025); I. A. Makarov et al., *Physica C* **633**, 1354706 (2025).

ОПТИМИЗАЦИЯ АЛГОРИТМОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ФЛЮОРЕСЦЕНЦИИ КАРОТИНОИДОВ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ НА РАЗЛИЧНЫХ АППАРАТНЫХ ПЛАТФОРМАХ

А.Н. Самарин^{1*}, Д.Д. Чесалин², В.А. Курков¹, Н.Н. Реутский³, Р.Ю. Пищальников¹

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, 119991, Москва, Россия

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Биологический факультет, 119991, Москва, Россия

³Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический факультет, 119991, Москва, Россия

*e-mail: sasha@lt.gpi.ru

Для моделирования спектров поглощения фотосинтетических пигментов каротиноидов был использован оптимизационный алгоритм дифференциальная эволюция (ДЭ). ДЭ относится к типу стохастических алгоритмов, работа которых основана на эволюционных принципах естественного отбора. Классическая версия ДЭ предлагает набор из 10 стратегий и пару настраиваемых параметров (F и Cr), выбор которых осуществляется в зависимости от оптимизируемой задачи [1]. При расчётах спектров поглощения применялась полуклассическая квантовая теория многомодовых броуновских осцилляторов [2] в которой оптимизируемые параметры модели обозначались x_i . Минимизируемая функция вычислялась как $f(x_i) = 1/N \sum_{j=1}^N [\sigma(x_i, \omega_j) - I(\omega_j)]^2$, где $\sigma(x_i, \omega_j)$ и $I(\omega_j)$ – расчётный и экспериментальный спектры; N – количество точек в спектре. Настройка ДЭ показала, что эффективной стратегией для моделирования спектров поглощения (Рис. 1) является $DE/best/1/bin$ при $F = 0.6$ и $Cr = 0.95$. Применяемые алгоритмы были адаптированы для применения на различных аппаратных платформах.

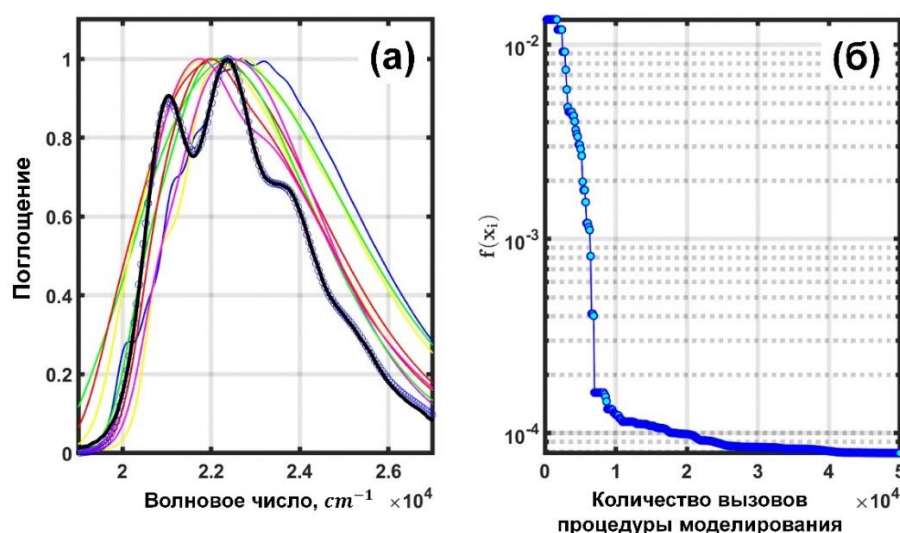


Рис 1. Цветные линии (а) – первые десять спектров в процессе эволюционной оптимизации. Целевая функция (экспериментальный спектр) черного цвета. Лучший расчётный спектр после оптимизации – синяя линия с кружками. Эволюция невязки между экспериментальным и расчётным спектрами $f(x_i)$ показана на графике (б).

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 25-21-00375

- [1] D.D. Chesalin, R.Y. Pishchalnikov, Appl. Soft Comput. **171**, 112753 (2025), <https://doi.org/10.1016/j.asoc.2025.112753>
- [2] D.D. Chesalin, E.A. Kulikov, I.A. Yaroshevich, E.G. Maksimov, A.A. Selishcheva, R.Y. Pishchalnikov, Swarm Evol. Comput. **75**, 101210 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.swevo.2022.101210>

СКЕЙЛИНГОВОЕ ПОВЕДЕНИЕ СЛОЖНЫХ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

М.А. Шляхтич^{1*}, П.В. Прудников², И. К. Сайфутдинов²

¹Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия

²Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077, Омск, Россия

*e-mail: mshlyakhtich@sfu-kras.ru

Статистические системы с медленной динамикой в последнее время вызывают значительный теоретический и экспериментальный интерес в связи с большим числом явлений наблюдаемых в них: сильное замедление релаксационных процессов, эффекты памяти, эффекты старения и др. [1]. После возмущения система с медленной динамикой обычно не достигает равновесия даже по прошествии длительного времени, и ее динамика не инвариантна ни по отношению к сдвигам времени, ни к обращению времени, как это должно быть в тепловом равновесии. Во время этой нескончаемой релаксации происходит старение: двукратные величины, такие как отклик и корреляционные функции, зависят от двух времен: времени ожидания t_w и времени наблюдения $t > t_w$, и их релаксация происходит медленнее для больших t_w . Это явление называется старением.

Конечные системы хорошо воспроизводят свойства бесконечных до тех пор, пока корреляционная длина ξ не превышает линейного размера системы L . Когда вблизи критической точки $\xi > L$, свойства критических систем в значительной мере зависят от типа периодических граничных условий, и при их наличии флуктуации могут "перекидываться" на противоположные стороны, чего в реальных системах не бывает. Следствием этого является появление эффектов "округления", например, появление эффектов дальнего порядка выше T_c , сглаживание пиков теплоемкости и восприимчивости, смещение их по температуре и т.д. Теория конечно-размерного скейлинга [2] позволяет экстраполировать результаты компьютерного моделирования с помощью методов Монте-Карло, полученные для систем с конечными размерами, к термодинамическому пределу.

Из этой теории мы можем оценить динамический критический показатель z , характеризующий увеличение времени автокорреляции τ_{cor} при приближении к критической точке T_c . Для этого мы используем конечно-размерный скейлинг для времен релаксации τ (L, T_c) $\sim L^z$.

В данной работе представлены результаты Монте-Карло исследования поведения различных наноструктур: ферромагнитных пленок с различными толщинами, спин-вентильных структур и многослойной магнитной гетероструктуры, представляющей собой трёхслойную тонкоплёночную систему с направленной магнитной анизотропией, ориентированной перпендикулярно плоскости плёнок. При рассчитанном значении критической температуры, проанализированы временные зависимости намагниченности, автокорреляционной функции, динамической восприимчивости при эволюции из различных начальных состояний.

Для описания свойств таких структур удобно использовать анизотропную модель Гейзенберга [3], относящуюся к статистическим спиновым моделям с медленной динамикой. Гамильтониан анизотропной модели Гейзенберга:

$$H = -J \sum_{i,j} \{ [1 - \Delta(N)](S_{xi}S_{xj} + S_{yi}S_{yj}) + S_{zi}S_{zj} \} - h \sum_i S_{iz}, \quad (1)$$

где $S_i = (S_{xi}, S_{yi}, S_{zi})$ – трехмерный единичный вектор в узле i , $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер, $\Delta(N)$ – параметр анизотропии. Значение $\Delta = 0$ соответствует изотропной модели Гейзенберга, а $\Delta = 1$ – модели Изинга. Периодические граничные условия накладывались в плоскости образца. Моделирование проводилось для систем с линейным размером $L=32$ и числом слоев N .

Теорией неравновесных процессов предсказывается следующий вид скейлинговой зависимости намагниченности:

$$m(t, t_w) \sim t_w^{-b} F_m(t/t_w), \quad (2)$$

где параметр $b = \beta/\nu z$ при температуре $T_s = T_c$.

Рассчитанная нами автокорреляционная функция $C(t; t_w)$ зависит от двух моментов времени t и t_w . Более того, для разных значений t_w данные явно попадают на разные кривые, а это означает, что инвариантность во времени нарушается. Это является одним из свойств стареющих систем.

Следовательно, динамика старения систем может зависеть от всей предыстории нашего образца. В режиме старения при $t - t_w \sim t_w \gg 1$ двухвременная зависимость автокорреляционной функции характеризуется скейлинговой формой:

$$C(t; t_w) \sim t_w^{-c} F_c(t/t_w), \quad (3)$$

где индекс c выражается через критические индексы $c = 2\beta/\nu z$ при температуре закалки $T_s = T_c$. При построении тех же данных для $C(t; t_w)$ в зависимости от t/t_w они лежат на одной кривой. Этот эффект наблюдается только при достаточно большом времени t_w . Наличие динамического скейлинга является одним из свойств стареющих систем.

Была рассчитана безразмерная динамическая корреляционная функция $R(t; t_w)$ [4] для оценки времени корреляции наших систем. При достаточно больших временах $R(t; t_w)$ уменьшается экспоненциально:

$$R(t; t_w) \sim \exp(-t/\tau_{\text{cor}}). \quad (4)$$

Динамический скейлинг для $R(t; t_w)$ имеет вид [5]:

$$R(t; t_w) \sim F_R(t/t_w) \quad (5)$$

Для описания отклонений от равновесного поведения в условиях медленной динамики вводится флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО), которое количественно характеризует степень нарушения ФДТ. Оно формулируется в виде следующего выражения [5]:

$$X_\infty(t_w) = \lim_{C(t, t_w) \rightarrow 0} T_c \partial \chi(t, t_w) / \partial C(t, t_w), \quad (6)$$

$$X_\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} X_\infty(t_w), \quad (7)$$

где $\chi(t, t_w)$ - динамическая восприимчивость. Для полученных значений $X(t_w)$, применив процедуру экстраполяции при $1/t_w \rightarrow 0$, получаем предельные значения ФДО X_∞ для моделируемых структур. Рассчитанные значения ФДО позволяют определить особенности изменения эффективной температуры при изменении толщин пленок магнитного металла магнитной гетероструктуры. Резкий пик в зависимости эффективной температуры фиксируется при переходе от квазидвумерной структуры $N = 3$ к системе, демонстрирующей признаки трёхмерного магнитного поведения $N = 21$. Данный эффект интерпретируется как кроссовер между двумерным и трёхмерным критическим режимами [6].

- [1] J.P. Bouchaud, E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, L.F Cugliandolo, Lect. Notes Phys. **184**, 492 (1997)
- [2] M.N. Barber, in Phase Transitions and Critical Phenomena Vol. 8 (Eds C Domb, J L Lebowitz) (New York: Academic Press, 1983) p. 1
- [3] K. Binder, D.P. Landau, Phys. Rev. B **13**, 1140 (1976)
- [4] M.A. Shlyakhtich, P.V. Prudnikov, Bulletin of the RAS: Physics, **87**, 389 (2023).
- [5] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, L. Peliti., Phys. Rev. E **55**, 3898 (1997)
- [6] P.V. Prudnikov, M.A. Menshikova et al., J. Magn. Magn. Mater. **387**, 77 (2015)

ВЛИЯНИЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ И ЗОННУЮ СТРУКТУРУ В ДЕСЯТИОРБИТАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ФЕРРОПНИКТИДОВ

Д.А. Иванов^{1*}, М.М. Коршунов^{1,2}

¹ Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия

² Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

*e-mail: danik.aliw@gmail.com

В данной работе рассматривается роль спин-орбитального взаимодействия в формировании топологии поверхности Ферми и зонной структуры в десятиорбитальной модели ферропниктидов в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам железа на элементарную ячейку [1].

На рисунке 1 показана поверхность Ферми как без учета спин-орбитального взаимодействия, так и при его наличии с константой λ . Химпотенциал μ рассчитывался самосогласованно.

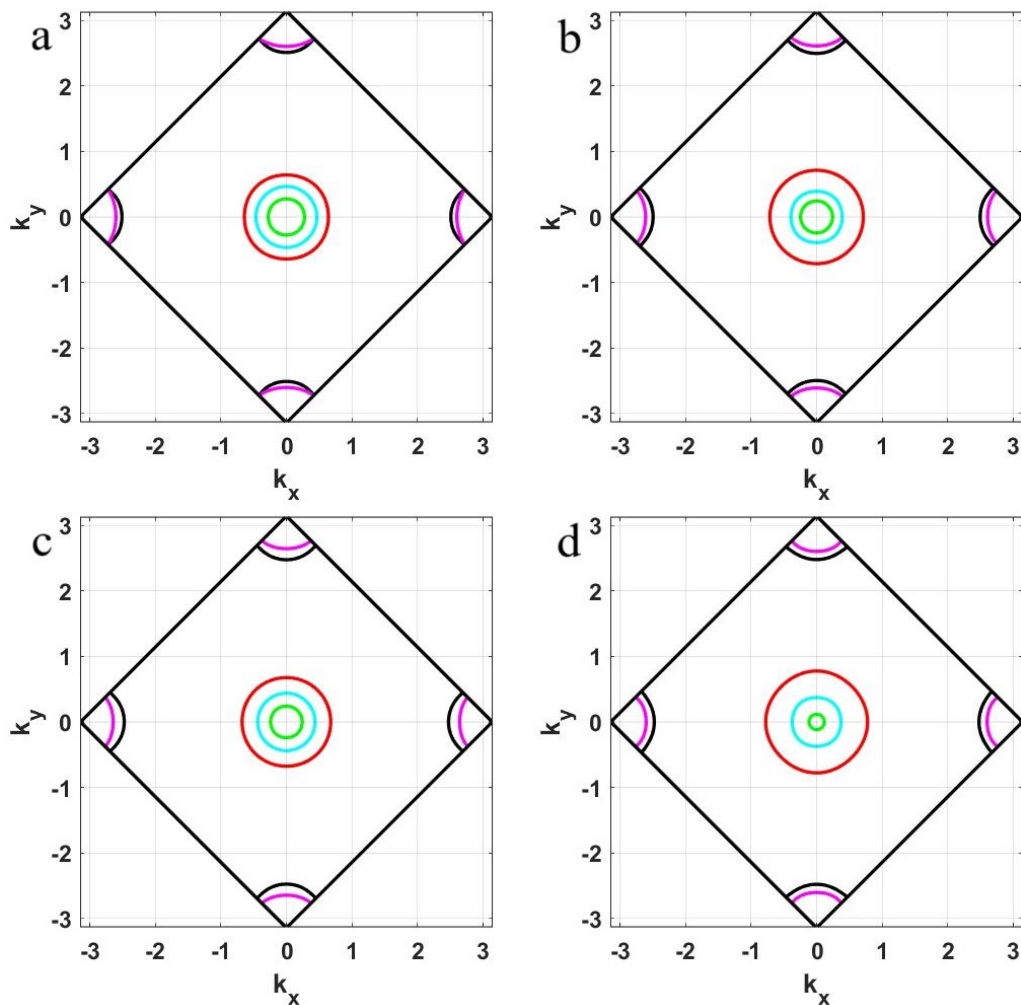


Рис. 1. Поверхность Ферми в десятиорбитальной модели в зоне Бриллюэна, соответствующей двум ионам железа на элементарную ячейку, при наличии спин-орбитального взаимодействия: (a) $\lambda = \lambda' = 0$, $\mu = -0.0126$ эВ; (b) $\lambda = 100$ мэВ, $\lambda' = 0$, $\mu = -0.0059$ эВ; (c) $\lambda = 0$, $\lambda' = 100$ мэВ, $\mu = -0.0092$ эВ; (d) $\lambda = \lambda' = 100$ мэВ, $\mu = 0.0057$ эВ.

Аналогичные результаты были получены ранее в трех- и пятиорбитальной моделях ферропниктидов [2, 3]. Однако видно, что изменение топологии поверхности Ферми вблизи

точки М появляется даже при наличии только внутриионного спин-орбитального взаимодействия, что, в свою очередь, является существенным отличием от результатов для трех- и пятиорбитальной моделей, где такой же эффект возникает только при наличии эффективного «межионного» спин-орбитального взаимодействия.

Исследование выполнено в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН.

- [1] H. Eschrig, K. Koepernik, Phys. Rev. B 80, 104503 (2009)
- [2] D.A. Ivanov, Yu.N. Togushova, M.M. Korshunov, J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys. 16, 795 (2023).
- [3] Иванов Д.А., Коршунов М.М. Сверхпроводимость: фундаментальные и прикладные исследования, №4, С. 12-18 (2024).

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРИБЛИЖЕНИЯ СРЕДНЕГО ПОЛЯ ДЛЯ МОДЕЛЬНОГО ОРТОНИКЕЛАТА

С.В. Нужин^{1*}, Ю.Д. Панов¹, А.С. Москвин^{1,2}, В.А. Улитко¹

¹Уральский федеральный университет, 620002, Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, 620108, Екатеринбург, Россия

*e-mail: nuzhin.stepan@urfu.ru

Благодаря уникальной кристаллической структуре и обладанием множеством полезных свойств перовскиты являются одними из самых перспективных материалов для фундаментальных и прикладных исследований. Рассматриваемые в текущей работе семейство редкоземельных ортоникелатов RNiO_3 со структурой перовскитов принадлежат к широкому классу ян-теллеровских магнетиков [1]. При понижении температуры в ортоникелатах осуществляется неканонический переход металл-изолятор в сопровождении антиферромагнитного упорядочения. Такой переход горячо дискутируется в научных кругах, поскольку традиционная модель перехода Мотта-Андерсона не позволяет корректно описать физику происходящих процессов в ортоникелатах.

Каждый кислородный октаэдр NiO_6 образует низкоэнергетический октет состояний. Для описания состояний октаэдров вводится волновая функция $|\Sigma M; \Gamma \gamma; S m\rangle$, где Σ обозначено значение зарядового псевдospина, M – его проекция, Γ – неприводимое представление, классифицирующее орбитальные состояния октаэдра в кристаллическом поле с кубической симметрией, γ – номер, разделяющий разные орбитальные состояния, S – значение спина, и проекция спина m . Состояние $[\text{NiO}_6]^{8-}$ соответствует синглету $|11; A_{1g} 1; 00\rangle$, $[\text{NiO}_6]^{9-}$ – спин-орбитальному квартету $|10; E_g 0; 1/2 \pm 1/2\rangle$, $|10; E_g 2; 1/2 \pm 1/2\rangle$, $[\text{NiO}_6]^{10-}$ – спиновому триплету $|1 - 1; A_{2g} 1; 10\rangle$, $|1 - 1; A_{2g} 1; 1 \pm 1\rangle$. Для описания физических свойств редкоземельных ортоникелатов до и после перехода металл-изолятор предлагается следующий эффективный гамильтониан [1]

$$\hat{H} = \frac{U}{2} \sum_i \hat{\mathcal{E}}_{zi}^2 - t \sum_{\langle ij \rangle m} (\hat{B}_{mi}^+ \hat{B}_{mj}^- + \hat{B}_{mj}^+ \hat{B}_{mi}^-) + V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\mathcal{E}}_{zi} \hat{\mathcal{E}}_{zj} + J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j,$$

в котором слагаемые с параметрами U и V учитывают локальные и нелокальные зарядовые корреляции, слагаемые с параметром t описывает парный перенос, а с J – сверхобмен.

Ранее [2] в приближении среднего поля (MFA) были найдены температурные зависимости параметров порядка чистых фаз и построены соответствующие фазовые диаграммы. В MFA средние поля ищутся путем минимизации оценки большого термодинамического потенциала. В работе [2] средние поля были найдены для чистых фаз, поскольку для таких случаев возможно написать их аналитически выражения. В данной работе рассматривается альтернативное решение задачи минимизации на основе численных методов, что позволяет уточнить фазовую диаграмму модели. Для минимизации функции используется алгоритм роя частиц [3]. Полученные результаты сравниваются с ранее полученными аналитическими выражениями.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда № 24-21-20147.

[1] A.S Moskvin, Jahn–Teller Magnets, *Magnetochemistry* **9**, 11 (2023)

[2] В.С. Рюмшин, *Физика твердого тела* **67**, 7 (2025)

[3] R.C. Eberhart, *Swarm intelligence*, Elsevier, (2001)

ТЕРМОДИНАМИКА ПЕРЕХОДА МЕЖДУ $S_{\pm}$ - И S_{++} -СОСТОЯНИЯМИ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

В.А. Шестаков^{1,*}, М.М. Коршунов¹

¹Институт физики им. Л. В. Кузнецкого СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

*e-mail: v_shestakov@iph.krasn.ru

Сверхпроводники на основе железа привлекают к себе внимание благодаря необычной сверхпроводимости, обусловленной существенно многозонной электронной структурой данных материалов [1]. Особый интерес вызывает устойчивость к полному подавлению сверхпроводимости при наличии в них немагнитного беспорядка, обусловленная возможностью смены структуры сверхпроводящего параметра порядка (сверхпроводящей щели) с ростом концентрации немагнитных примесей в системе [2]. При смене структуры сверхпроводящей щели происходит переход от параметра порядка $s_{\pm}$ -типа, меняющего знак между зонами, к s_{++} -параметру порядка, сохраняющему один и тот же знак в пределах различных зон. Такой переход имеет различный характер в зависимости от величины рассеивающего потенциала примеси: вблизи борновского предела (слабо рассеивающей примеси) при низких температурах ($T \sim 0.01T_{c0}$) смена структуры сверхпроводящего параметра порядка происходит скачком, а с ростом величины потенциала примеси этот скачок сглаживается [3, 4]. С ростом температуры (до температур, не превышающих значения $T \approx 0.1T_{c0}$) данный скачок также сглаживается. Пролить свет на причину такого поведения помогает исследование термодинамических свойств системы: температурной зависимости большого термодинамического потенциала Ω и его производных по температуре – энтропии и электронной теплоёмкости. На практике обычно рассматривается не сам термодинамический потенциал Ω , а разность между энергией в сверхпроводящем и нормальном состояниях, $\Delta\Omega = \Omega_S - \Omega_N$ [5, 6].

Выражение для $\Delta\Omega$ получено в рамках двухзонной модели сверхпроводников с немагнитными примесями [7]. Учёт влияния примесей выполнен в приближении $\mathcal{T}$ -матрицы в рамках многозонной теории Элиашберга [2]. Построена зависимость изменения теплоёмкости ΔC в зависимости от температуры и беспорядка вблизи перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ скачком. Исследована область смены характера перехода со скачкообразного на плавный при увеличении температуры.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-20043, <https://rscf.ru/project/25-22-20043/>, гранта Красноярского краевого фонда науки.

- [1] P.J. Hirschfeld, M.M. Korshunov, I.I. Mazin, Rep. Prog. Phys. **74**, 124508 (2011)
- [2] М.М. Коршунов, Ю.Н. Тогусова, О.В. Долгов, УФН, **186**, 12, 1315 (2016)
- [3] V.A. Shestakov, M.M. Korshunov, Yu.N. Togushova, D.V. Efremov, O.V. Dolgov, Supercond. Sci. and Technol., **31** 034001 (2018)
- [4] V.A. Shestakov, M.M. Korshunov, O.V. Dolgov, Symmetry, **10** 323 (2018)
- [5] J.M. Luttinger, J. C. Ward, Phys. Rev., **118** 1417 (1960)
- [6] J.M. Luttinger, Phys. Rev., **119** 1153 (1960)
- [7] V.A. Shestakov, M.M. Korshunov, Supercond. Sci. and Technol., **38** 055002 (2025)

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЁТЫ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ОДНООСНОГО КИРАЛЬНОГО ГЕЛИМАГНЕТИКА

Д.В. Евсин^{1,*}, М.В. Мамонова¹, П.В. Прудников^{2,1}

¹Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

²Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644040, ул. Нефтезаводская 54,
Омск, Россия

*e-mail: evsindv@stud.omsu.ru

Магнитные кристаллы со слоистой структурой, в которых наблюдается периодическое киральное гелимагнитное упорядочение, интересны в качестве материалов для устройств спинтроники [1]. К таким структурам относится гелимагнетик $CrNb_3S_6$, обладающий кристаллографической киральностью и одноосным взаимодействием Дзялошинского-Мория [2]. Экспериментальные исследования показали зависимость периода кирального гелимагнетика от внешнего магнитного поля при постоянной температуре, а именно переход к состоянию киральной солитонной решётки в тонких сколах [3].

В данной работе исследуются магнитные свойства одноосного кирального гелимагнетика $CrNb_3S_6$ путём первопринципных расчётов с применением программно-пакетного комплекса VASP [4]. Кристаллическая структура исследуемой системы представлена на Рис. 1. В расчётах использовалась 60-атомная суперъячейка плёнки с постоянной решетки $a = 27.223 \text{ \AA}$ [5]. Количество k -точек сетки Монкхорста-Пака принималось равным $4 \times 4 \times 4$. Величина энергии обрезания устанавливалась равной 500 эВ. Для распространённой вдоль оси C суперъячейки вектор распространения спиновой спирали задавался $q = 0.025a$ по направлению вдоль оси C .

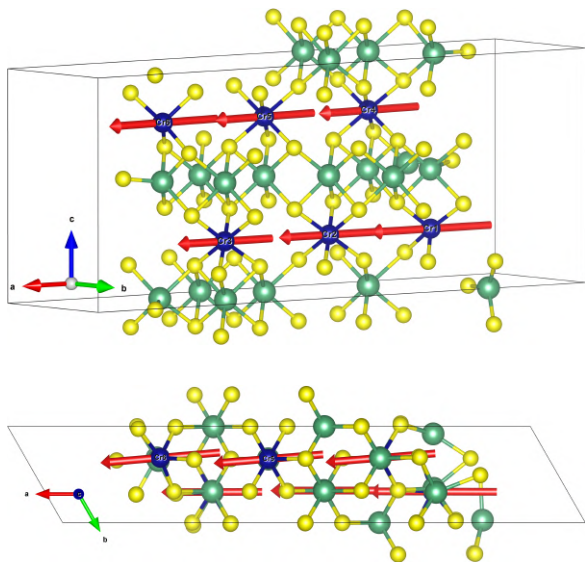


Рис. 1. Кристаллическая структура 60-атомной ячейки плёнки одноосного кирального гелимагнетика $CrNb_3S_6$. Синим цветом обозначены атомы хрома, зелёным – ниобия, жёлтым – серы. Красными стрелками указаны направления намагниченностей атомов хрома. Сверху представлен изометрический вид, снизу – вид вдоль оси C

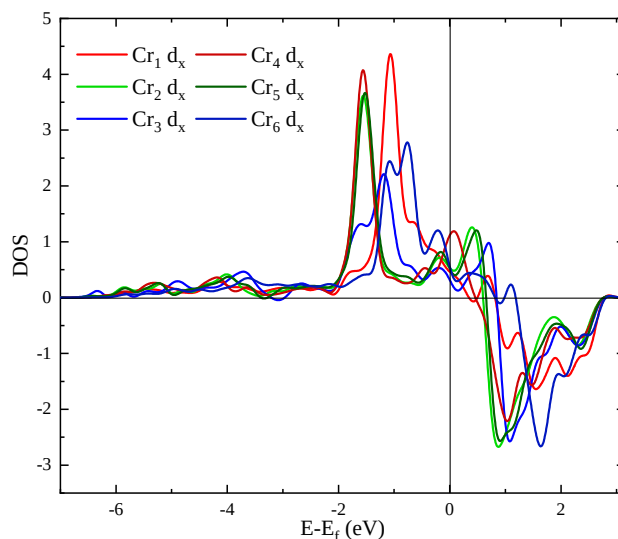


Рис. 2. Проекция на ось x плотностей состояний электронов d -орбиталей для «внутренней» (Cr_2 и Cr_5) и «краевых» пар атомов хрома (Cr_1, Cr_4 и Cr_3, Cr_6) в магнитной тройной плёнке.

В ходе расчётов были получены значения проекций магнитных моментов атомов хрома. Среднее значение угла поворота намагниченности между слоями хрома составило 4.69° , что близко к экспериментальному значению в 4.5° [1] и может быть вызвано краевыми эффектами плёнки. Также было получено значение полной энергии системы $E_{tot} = -440.52242$ эВ. На Рис. 2 приведён график проекций на ось x плотностей состояний электронов d-орбиталей для «внутренней» (Cr_2 и Cr_5) и «краевых» пар атомов хрома (Cr_1 , Cr_4 и Cr_3 , Cr_6) в магнитной тройной плёнке. Кривые электронных состояний для «внутренней» пары атомов хрома почти наслаиваются друг на друга, демонстрируя поведение характерное для объёмного образца, тогда как кривые электронной плотности атомов, принадлежащих к «краевым» парам заметно отличаются друг от друга даже внутри своих пар, что говорит о влиянии краевых эффектов на поведение намагниченности в плёнке.

- [1] Y. Togawa, Y. Kousaka, K. Inoue, K. Kishine, J. Phys. Soc. Jpn 85, 112001 (2016)
- [2] D. Song, et al., Phys. Rev. B 102, 64432 (2020)
- [3] Y. Togawa, et al., Phys. Rev. L 122, 017204 (2019)
- [4] G. Kresse, M. Marsman, J. Furthmuller, VASP the GUIDE, Wien: Universitat Wien, (2016)
- [5] Y. Ghimire, et al., Phys. Rev. B 87, 104403. (2013)

КВАНТОВАЯ МАКРОФИЗИКА: СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ПЕРИФЕРИЧЕСКОГО АНТЕННОГО КОМПЛЕКСА ПУРПУРНЫХ БАКТЕРИЙ

М.М. Коршунов^{1*}, Е.А. Ковалева^{1,2}, Л.В. Бегунович^{1,2}

¹*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия*

²*ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*

*e-mail: mkor@iph.krasn.ru

Цель исследований направления Квантовая макрофизика – описание квантовых систем и проявления квантовых свойств на макроскопических масштабах. Круг вопросов широк и включает изучение таких явлений, как высокотемпературная и необычная сверхпроводимость, фотосинтез в бактериях и растениях. Для решения задач используются современная экспериментальная база и методы теоретической физики, включающие квантово-механическое моделирование структуры вещества, расчеты свойств систем в рамках теории функционала плотности, методы исследования многозонной электронной структуры с учётом электронных корреляций.

Процесс фотосинтеза включает в себя временные промежутки от пикосекунд до секунд. В то время, как большие промежутки могут быть предметом изучения физической химии или биохимии, для малых промежутков необходимо привлекать описание в рамках квантовой теории. В самом начале процесса поглощение света идёт в так называемом светособирающем (LH) комплексе [1]. Периферический светособирающий комплекс (LH2) несультатных пурпурных бактерий *Rhodoblastus Acidophilus*, содержащий 27 молекул бактериохлорофилла *a* (BChl *a*), объединенных в две подсистемы (B800 и B850), дающие в общем спектре поглощения LH2 характеристические пики поглощения на 800 и 850 нм, широко используется в качестве модельного объекта для изучения процессов переноса энергии в фотосинтетических структурах [2]. Нами проведено моделирование подсистемы B800 квантовохимическими методами. Определена минимальная модель аминокислотного окружения, позволяющая описать спектр поглощения B800. Продемонстрирована важность учета обменного взаимодействия для корректного описания этого спектра [3]. При помощи нестационарных расчетов на основе теории функционала плотности исследованы оптические свойства подсистемы B800. Полученные в результате расчетов спектры поглощения как одиночной молекулы BChl *a*, так и оптимизированной структуры B800, качественно согласуются с экспериментальными данными. Доказано отсутствие значимых эффектов, обусловленных взаимодействием между соседними молекулами [4].

Исследование выполнено в рамках научной тематики Госзадания ФИЦ КНЦ СО РАН.

- [1] T. Mirkovic, E.E. Ostroumov, J.M. Anna, R. van Grondelle, Govindjee, G.D. Scholes, *Chem. Rev.* **117**, 249 (2017).
- [2] S. Maity, U. Kleinekathofer, *Photosynth. Res.* **156**, 147 (2023).
- [3] L.V. Begunovich, E.A. Kovaleva, M.M. Korshunov, V.F. Shabanov, *Journal of Photochemistry & Photobiology A: Chemistry* **450**, 115454 (2024).
- [4] E.A. Kovaleva, L.V. Begunovich, M.M. Korshunov, *Journal of Photochemistry & Photobiology A: Chemistry* **468**, 116489 (2025).

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СПИН-ВЕНТИЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУР

Е.В. Дроворуб^{1*}, П.В. Прудников²

¹Омский Государственный Университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

²Центр новых химических технологий ИК СО РАН, Институт катализа им. Г.К.

Борескова СО РАН, г. Омск, Россия

*e-mail: drovorub.egor@gmail.com

Открытие спин-вентильных наноструктур положило начало нового этапа совершенствования свойств структур с эффектом гигантского магнитосопротивления (ГМС) [1]. Спиновые вентили состоят из двух ферромагнитных пленок, разделенных немагнитной прослойкой, но ориентация намагниченности одного из слоев плотно закреплена за счет сильной обменной связи со слоем антиферромагнетика. В то же время направление намагниченности во втором слое может свободно меняться под воздействием малых магнитных полей. Преимуществом спин-вентильных структур, по сравнению с мультислойными, являются малые поля насыщения (5-50 Э), что делает их практическое использование наиболее выгодным.

В данной работе осуществлено Монте-Карло моделирование температурных характеристик и эффектов гистерезиса намагниченности и коэффициента магнитосопротивления в различных типах спин-вентильных наноструктур. К описанию магнитных свойств пленок применялась анизотропная модель Гейзенберга [2] с анизотропией типа “легкая плоскость”.

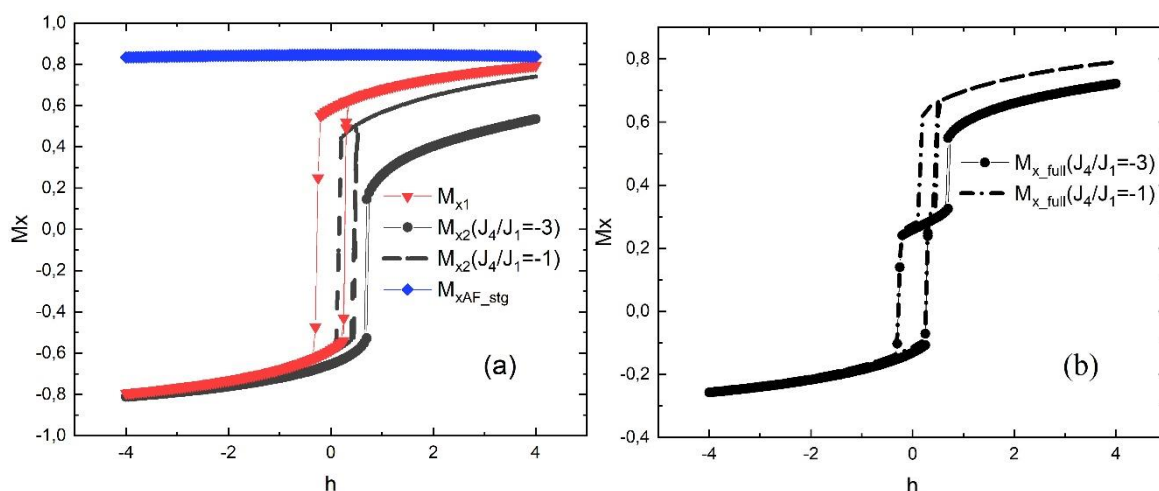


Рис. 1. Петли гистерезиса намагниченности для отдельных пленок (a) и всей структуры (b) с анизотропией типа “легкая плоскость” при температуре $T=1.0J_1/k_B$.

В качестве примера полученных результатов моделирования на рис. 1a представлены петли гистерезиса ферромагнитных пленок и шахматная намагниченность антиферромагнетика. Шахматная намагниченность антиферромагнетика всегда находится в области насыщения, даже при больших значениях поля ($h=-4$ и 4). Присутствует обменное смещение петли гистерезиса закрепленной пленки в область полей $H_{ex}=0.75$, что обусловлено сильным воздействием со стороны антиферромагнетика. Ориентация намагниченности свободной пленки легко меняется в области нуля поля. На рис. 1b представлена общая петля гистерезиса системы, которую можно сопоставить с экспериментальными работами.

[1] B. Dieny, *J. Magn. Magn. Mat.*, **136** (1994) 335-359.

[2] E.V. Drovorub, V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, *Bull. Russ. Acad.*, **86** (2022) 158-164.

ЭНТРОПИЙНЫЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В АНИЗОТРОПНЫХ СИСТЕМАХ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

Д.А. Друзев^{1,*}, В.В. Хитринцева¹, П.В. Прудников^{1,2}

¹ Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

² Центр новых химических технологий ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН,
644040, Омск, Россия

*e-mail: druzev1@mail.ru

Природа магнитного порядка весьма сложна из-за конкуренции между различными межспиновыми взаимодействиями, а также сильного влияния формы и магнитокристаллической анизотропии образцов. Поэтому физические свойства «сложных» систем необходимо описывать в рамках анизотропной модели Гейзенберга[1], в работе[2] был впервые применен модифицированный алгоритм Ванга-Ландау [3] для исследования свойств данной модели. В данном же докладе будут представлены результаты моделирования системы с конкурирующими взаимодействиями, гамильтониан которой можно записать в виде:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - D \sum_i [(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2], \quad (1)$$

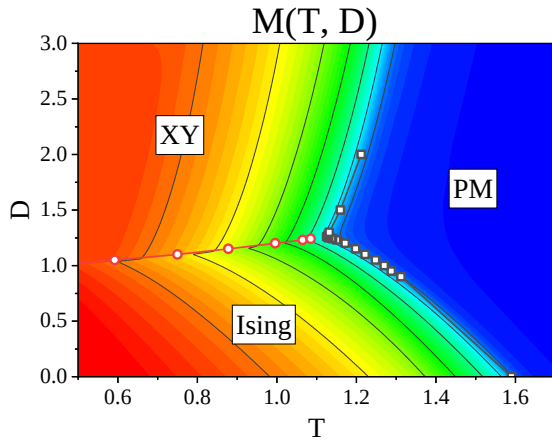


Рис. 1: Двупараметрические зависимости намагниченности $M(T, D)$ для параметра анизотропии $\Delta = 0.3$. Цветными точками обозначены кривые фазовых переходов, рассчитанные методом Метрополиса: красным — переход первого рода, чёрным — переход второго рода.

Ключевым преимуществом метода является то, что он напрямую определяет плотность состояний $g(E)$ — количество микросостояний с энергией E , что позволяет вычислить энтропию системы $S(E) = k_B \ln g(E)$. Анализируя поведение энтропии, можно более детально изучить механизмы возникновения и разрушения магнитного порядка в системе.

где D — параметр одноионной анизотропии, а Δ — параметр обменной анизотропии («лёгкая ось»).

Проводя блуждание по пространству энергетических уровней, алгоритм Ванга-Ландау позволяет рассчитать статистическую сумму системы, переходя от суммирования по конфигурациям к суммированию по энергетическим уровням:

$$Z(T) = \sum_i e^{-E(X_i)/k_B T} = \sum_E g(E) e^{-E/k_B T}, \quad (2)$$

а затем рассчитать намагниченность (рис. 1) и другие термодинамические величины в широком диапазоне входных параметров без дополнительных симуляций.

- [1] P. V. Prudnikov, V. V. Prudnikov, M. A. Menshikova and N. I. Piskunova, J. Magn. Magn. Mater. **387**, 77 (2015)
- [2] Д. А. Друзев, А. А. Чубарова и П. В. Прудников, Письма в ЖЭТФ **122**, 3 (2025)
- [3] R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, Phys. Rev. E **75**, 046701 (2007)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

И. А. Мамонов*, П. В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077, Омск, Россия

*e-mail: mamonov.ivan.omsk@gmail.com

В работе представлены результаты численного исследования критической точки фазового перехода второго рода для трехмерной анизотропной модели Гейзенберга методами машинного обучения. Исследование термодинамических свойств проведено односпиновым алгоритмом Метрополиса. Для расчета и уточнения критических характеристик спиновых систем применялся метод машинного обучения на основе свёрточной нейронной сети. На основе значительного набора данных для трехмерной анизотропной модели Гейзенберга было эффективно проведено обучение модели нейронной сети.

Трехмерная классическая ферромагнитная модель Гейзенберга, описывающая важный класс изотропных магнетиков, является одной из традиционных статистических моделей, используемых для описания фазовых переходов в различных спиновых системах, в частности, в таких переходных металлах, как Fe, Co, Ni и их сплавах. Анизотропная модель Гейзенберга используется для описания магнитных свойств мультислойных наноструктур [1]. В работе был использован гамильтониан анизотропной модели Гейзенберга:

$$H = -J_1 \sum [S_i S_j - \Delta S_i^z S_j^z] - J_2 \sum [S_\alpha S_\beta - \Delta S_i^z S_j^z] - A \sum (S_i^z)^2 - h \sum S_i,$$

где $S_i = \{S_i^x, S_i^y, S_i^z\}$ – классический гейзенберговский спин, J_1 – интеграл внутрислоевого обменного взаимодействия, J_2 – интеграл межслоевого обменного взаимодействия, $A = 1$ – характеризует одноионную анизотропию, h – приложенное магнитное поле, $\Delta(N_k) = 0,63$ – параметр обменной анизотропии, N – толщина ферромагнитной пленки трехплочной мультислойной структуры.

Расчет критических свойств систем, описываемых моделью Гейзенберга, методами Монте-Карло, осуществляется путем усреднения по большому числу статистических прогонок [2], что требует использования значительных вычислительных ресурсов. Благодаря возможности обобщать и обрабатывать большие наборы данных, методы машинного обучения имеют потенциал к более быстрому и точному решению сложных многопараметрических задач, по сравнению с классическими методами.

Обучение осуществлялось на наборе из 600 статистических конфигураций для 600 температурных шагов, где один температурный шаг был равен $T_{\text{step}} = 0,01 J_1$. Значения функции потерь, получаемой на выходном слое нейросети, позволяют решить задачу классификации и по точке пересечения данных для различных выходов определить точку фазового перехода.

Исследования показали, что выбор N существенен при определении точного значения критической температуры выбранной модели. Кроме этого, важными параметрами моделирования являются: линейный размер системы, температурный шаг и количество статистических конфигураций. Увеличение столь важных параметров неминуемо ведет к повышению времени расчета необходимых конфигураций для машинного обучения.

Полученные данные в окрестности критической температуры обладают свойством универсальности, что подтверждается возможностью построения скейлинговой зависимости для различных размеров решетки [3].

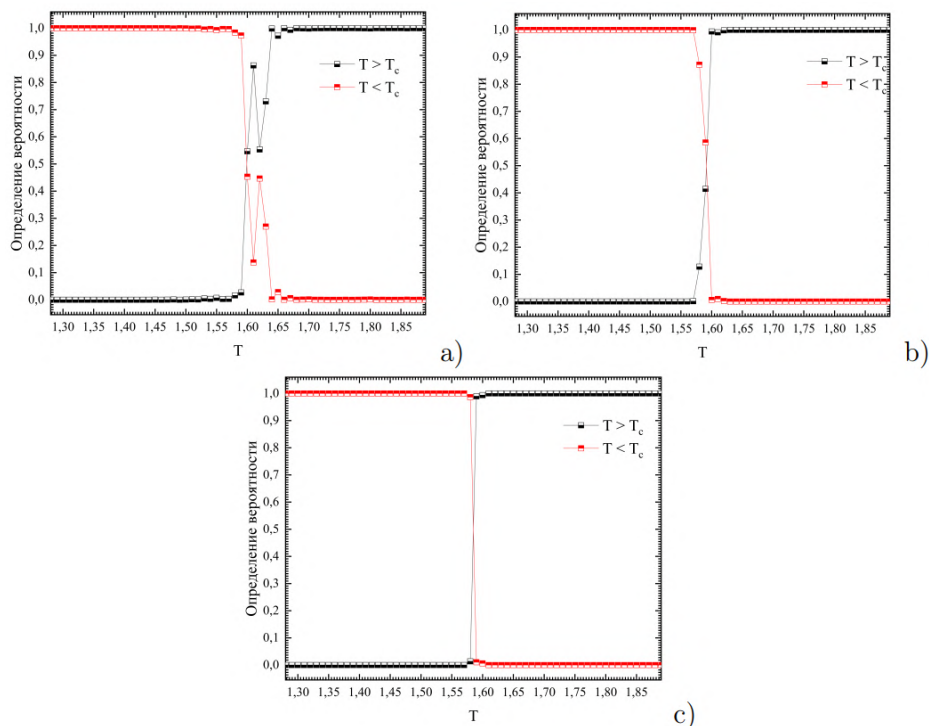


Рис 1. Графики зависимости данных выходного слоя от температуры при толщине пленки $N = 32$ для линейного размера L : а) 8, б) 16, в) 32.

На Рис. 1 представлены зависимости данных выходного слоя от температуры для разных толщин пленок. На основе пересечения данных выходного слоя в работе была получена оценка критической температуры для трехмерной анизотропной модели Гейзенберга $T_c = 1.585 \pm 0.01 J_1$.

В данной работе методами компьютерного моделирования были получены значения критической температуры T_c для фазового перехода в мультислойной сверхструктуре при толщине ферромагнитных пленок $N = 32$ и линейного размера $L = 8, 16, 32$. Для создания обучающего набора данных использовалось обучение с учителем на основе спиновых конфигураций подготовленных методом Монте-Карло [4,5]. Главной особенностью данного вида обучения является возможность использования в задачах классификации и регрессии.

[1] Прудников В.В., Прудников П.В., Хитринцева В.В. Неравновесное критическое поведение слабо неупорядоченной трехмерной анизотропной модели Гейзенберга // Вестник Омского университета. 2022. Т. 27. № 2. С. 31-39.

[2] Прудников В.В., Вакилов А. Н., Прудников П. В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. М.: Физматлит, 2009. 224 с.

[3] Azizi A., Pleimling M. A cautionary tale for machine learning generated configurations in presence of a conserved quantity. // Scientific Reports. 2021. V. 11. Art. 6395

[4] Chubarova A. A., Prudnikov P.V., Mamonov I. A. and Mamonova M. V. Critical scaling behavior of anisotropic spin systems by machine learning approach. // preprint, — 2025

[5] Мамонов И. А., Прудников П. В., Исследование критических свойств сложных спиновых систем методами машинного обучения. // XLVII региональная научно – практическая конференция «Молодежь третьего тысячелетия»: сборник научных статей. Омск : Изд-во Ом. гос. ун-та, — 2023. — 588-591 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА ПОВЕДЕНИЕ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

В.В. Хитринцева^{1,*}

¹Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

*e-mail: valeri_valeria@mail.ru

Наличие структурных дефектов кристаллической решетки характерно для всех реальных веществ. Исследование влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение систем является интересной и актуальной задачей, поскольку малое количество примеси может привести к существенным изменениям поведения системы в области точки фазового перехода T_c [1].

Осуществлено численное Монте-Карло исследование особенностей влияния точечных замороженных дефектов структуры на неравновесное критическое поведение анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось», гамильтониан имеет вид [2]:

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

где $J > 0$ – интеграл обменного взаимодействия; S_i^x, S_i^y, S_i^z – компоненты трехмерного единичного спинного вектора $\vec{S}_i$; случайные величины p_i, p_j характеризуют замороженный структурный беспорядок в системе, p_i принимает значение $p_i = 1$ или 0 в зависимости от наличия или отсутствия немагнитного дефекта в i -м узле; Δ – параметр анизотропии. При $\Delta = 0$ гамильтониан соответствует трехмерной изотропной структурно неупорядоченной модели Гейзенберга, при $\Delta = 1$ – трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга. В данном исследовании $\Delta = 0.63$ [3].

Исследовано неравновесное критическое поведение систем с различной спиновой концентрацией $p = 1.0, 0.9, 0.8, 0.6, 0.5$:

1. При эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$ и при эволюции из высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$ в двухвременной зависимости автокорреляционной функции $C_z(t, t_w)$ и динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ выявлено проявление эффектов старения для чистой системы и сверхстарения для неупорядоченных. Для автокорреляционной функции и динамической восприимчивости характерно замедление корреляционных и релаксационных процессов.
2. Исследовано нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы и рассчитаны значения предельного ФДО при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния.
3. На основе значений ФДО и критических индексов, определенных из анализа временной зависимости намагниченности, для систем с различными спиновыми концентрациями, выявлено, что трехмерная анизотропная модель Гейзенберга является изингоподобной. Следовательно, изменение концентрации дефектов структуры приводит к изменению характеристик неравновесного критического поведения. Определено 3 класса универсальности критического поведения, соответствующие чистой, слабо неупорядоченной и сильно неупорядоченной системам.

- [1] Ш. Ма, Современная теория критических явлений, Пер. с англ. А.Н. Ермилова, А.М. Курбатова; под ред. Н.Н. Боголюбова (мл.), В.К. Федянина, Москва: Мир, (1980)
- [2] K. Binder, D.P. Landau, Phys. Rev. B. **13**, (1976)
- [3] П.В. Прудников, В.В. Прудников, М.А. Медведева, Письма в ЖЭТФ **100**, (2014)

РАСЧЕТ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНКАХ FE, NI, CO И ИХ БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

М.Ю. Макеев*, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077, Омск, Россия

*e-mail: makMich@yandex.ru

В данной работе выполнены первопринципные расчеты для трехслойных структур состоящих из ферромагнитных пленок бинарных соединений $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$ и $\text{Co}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$, разделенных немагнитной прослойкой из Cu или Cr, толщиной в три монослоя.

Никелевые сплавы активно используются в промышленности. Это привело к накоплению большого массива экспериментальных данных по их структурным, электрическим и магнитным свойствам для самых разных составов. Эти данные являются строгой проверкой для теоретических моделей обменного взаимодействия.

Никель сам по себе является ферромагнетиком с кубической гранецентрированной решеткой (ГЦК). Легируя никель другими элементами, например Fe или Co, можно плавно и контролируемо изменять силу обменного взаимодействия между атомами Ni.

Для определения постоянной решетки, а также, значений полной энергии и магнитных моментов использовался программный комплекс VASP [1], который с помощью первопринципного подхода позволяет выполнить квантово-механические расчеты электронной структуры материалов на основе теории функционала плотности (DFT). Используя результаты, полученные с помощью VASP, были рассчитаны интегралы обменного взаимодействия J.

Обменное взаимодействие J рассчитывалось следующим образом:

$$J_j = \Delta N_{ji}^{-1} \Delta E_i$$

Где ΔN_{ji}^{-1} – обратная матрица разности соседей антиферромагнитного N_{afm} и ферромагнитного N_{fm} состояний, ΔE_i – разность энергий антиферромагнитного E_{afm} и ферромагнитного E_{fm} состояний.

$$\Delta N = N_{afm} - N_{fm}$$

$$\Delta E = E_{afm} - E_{fm}$$

N рассчитывалось как $N = -\sum_{ij} S_i S_j$. Для случая учета взаимодействия ближайших соседей N ($j = 1$) и следующих ближайших соседей NN ($j = 2$) получим следующее выражение:

$$\begin{pmatrix} J_N \\ J_{NN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta N_1 \Delta N N_1 \\ \Delta N_2 \Delta N N_2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \Delta E_1 \\ \Delta E_2 \end{pmatrix}$$

Более подробная методика расчета и результаты расчетов для пленок чистых металлов представлены в работе [2].

В рамках данного исследования для каждого из материалов (Fe, Ni, Co) были смоделированы отдельные расчетные ячейки. Конфигурация ячеек соответствовала тонкопленочной геометрии, где толщина пленки варьировалась от одного до трех атомных монослоев, количество атомов в слое ограничивалось четырьмя атомами. Начальное антиферромагнитное состояние задавалось послойной антипараллельной ориентацией спиновых моментов. Равновесные постоянные решетки a_{Ni} , a_{Fe} , a_{Co} получены путём полной структурной релаксации (ионные позиции + объём ячейки) в рамках функционала плотности с использованием пакета VASP.

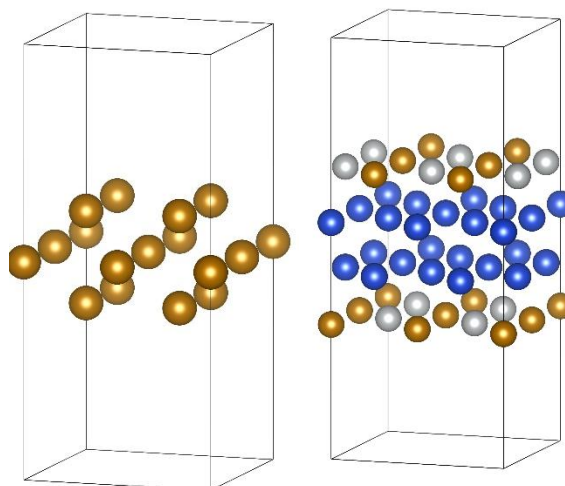


Рисунок 1. Пример используемых для расчета ячеек.

Результаты обменного взаимодействия представлены в таблице 1.

Таблица 1. Обменное взаимодействие для пленок ферромагнитных металлов

J_1 , мЭв	1 монослой	2 монослоя	3 монослоя
Fe	31,343	43,185	22,224
Co	60,962	92,148	42,625
Ni	20,705	10,476	14,447

Таблица 1 показывает, что высокие значения J_1 у кобальта согласуются с наибольшей температурой Кюри (ТС) среди этой тройки, в то время как никель, имеющий наименьший атомный магнитный момент и ТС, закономерно показывает наименьшие значения обменных интегралов. Поведения J для Fe и Co указывает на сильную зависимость магнитных свойств от толщины в ультратонком пределе.

Получив значение обменного взаимодействия для пленок, мы приступили к изучению влияния бинарных соединений на значение обменного взаимодействия.

Таблица 2. Значение полной энергии E_0 для ферромагнитной ФМ и антиферромагнитной АФМ системы, результаты расчетов интегралов обменного взаимодействия J .

Система	Атомы	E_0 , эВ. ФМ	E_0 , эВ. АФМ	J		
				мЭВ.	Эрг, 10^{-14}	mRy
CoNi/Cu	Co-Ni	-186,175	-183,367	-28,655	-4,590	-2,106
FeNi/Cu	Fe-Ni	-91,431	-90,855	8,991	1,440	0,660
FeNi/Cr	Fe-Ni	-630,753	-628,863	7,386	1,183	0,542

Из таблицы 2 видно, что подложка активно участвует в обменных процессах. Изменение подложки с Cu на Cr для одной и той же пары Fe-Ni приводит к ослаблению ферромагнитной связи на ~18%. Это показывает, что подложка может выступать в роли «контроллера» магнитных свойств. Введение в никелевую плёнку атомов Fe и Co, а также выбор материала подложки, позволяют целенаправленно управлять не только силой, но и знаком обменного взаимодействия.

[1] P. G. Kresse, J. Furthmuller, Phys. Rev. B. **16**, 11169 (1996)

[2] M. Yu. Makeev, M. V. Mamonova Mathematics Physics **16(6)**, 773-779 (2023)

Исследование влияние квантовых шумов на точность гибридного алгоритма VQE

П.И. Коцур¹, А.Р. Журавлева¹, А.Н. Вакилов¹

¹ Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

*e-mail: grjweb_2004@mail.ru

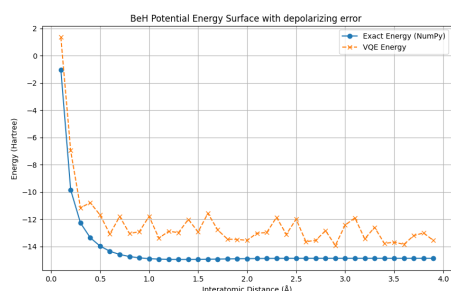
Квантовые компьютеры открывают новые перспективы для квантовой химии, предлагая принципиально новый подход к решению задач квантовой механики многих тел. В отличие от классических вычислительных методов, сталкивающихся с экспоненциальным ростом сложности при описании многоэлектронных систем, квантовые алгоритмы позволяют непосредственно эмулировать квантовые процессы благодаря параллелизму и явлениям квантовой запутанности [1].

Использование гибридных методов особенно актуально, поскольку современные квантовые процессоры всё ещё обладают ограниченным количеством кубитов и подвержены воздействию шумов.

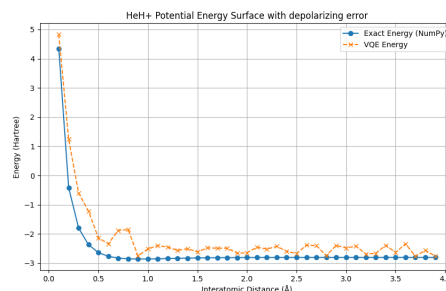
В представленном исследовании реализована методика моделирования энергетических характеристик молекулярных систем HeH^+ и BeH_2 с использованием вариационного квантового метода (VQE). Эксперименты проведены в рамках двух вычислительных сценариев:

1. **Идеализированная модель:** Моделирование в условиях отсутствия декогеренции и с идеальной реализацией квантовых гейтов
2. **Реалистичная модель:** Моделирование с имплементацией комплексной шумовой модели, параметризованной экспериментальными характеристиками сверхпроводящих кубитов платформы IBM Quantum (времена когерентности T_1 , T_2 , ошибки гейтов и измерений)

Выбор модельных систем обусловлен стратегией постепенного усложнения вычислительной задачи: от простейшей двухэлектронной системы HeH^+ к более сложной шестиэлектронной системе (BeH_2) [2].

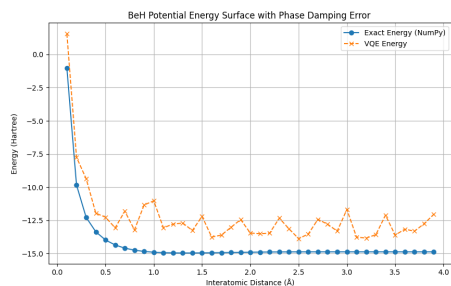


(a) Молекула BeH_2

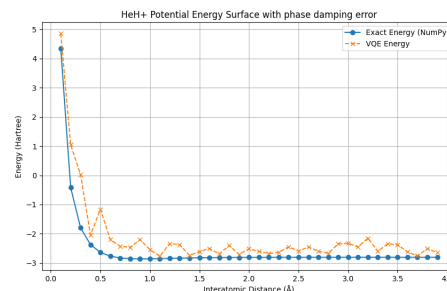


(b) Ион HeH^+

Рис. 1. Графики распределения энергии с учётом деполяризующего шума

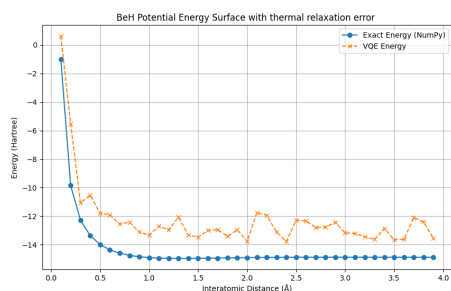


(a) Молекула BeH₂

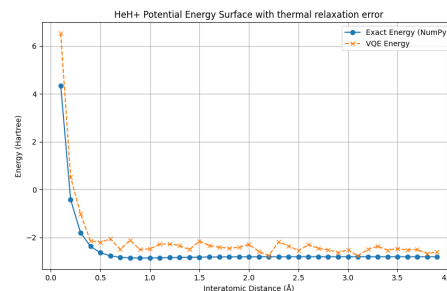


(b) Ион HeH⁺

Рис. 2. Графики распределения энергии с учётом фазовой ошибки

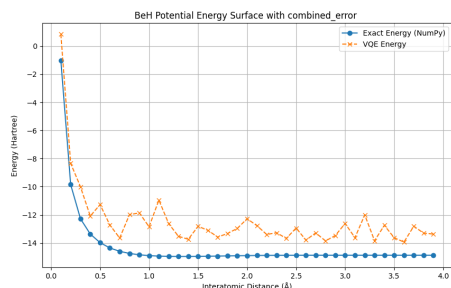


(a) Молекула BeH₂

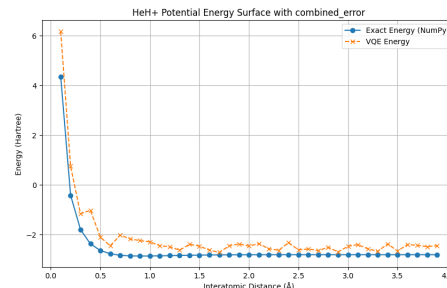


(b) Ион HeH⁺

Рис. 3. Графики распределения энергии с учётом ошибки термальной релаксации



(a) Молекула BeH₂



(b) Ион HeH⁺

Рис. 4. Графики распределения энергии с учётом комбинированного шума

Полученные результаты демонстрируют существенное влияние шумовых факторов на точность определения энергии основного состояния (Рис. 3, Рис. 4) и позволяют оценить уровень ошибок, связанных с декогеренцией и неидеальностью выполнения квантовых операций.

- [1] Мерседес Х., Ник Х., Эрик Д. Программирование квантовых компьютеров. Базовые алгоритмы и примеры кода. — СПб.: Питер, 2021. — 256 с.
- [2] Шарки К. Л., Чанс А. Квантовая химия и квантовые вычисления с примерами на Python. — М.: ДМК Пресс, 2023. — 320 с.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ДВУМЕРНОЙ СПИНОВОЙ СИСТЕМЫ

Д.А. Лихтнер^{1,*}, П.В. Прудников¹

¹ Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

В данной работе представлены результаты нахождения основного состояния спиновой системы двумерной модели Гейзенберга методами машинного обучения без учителя. Для генерации спиновых конфигураций была применена полносвязная нейронная сеть, в качестве функции потерь нейронной сети выступала усредненная плотность энергии по набору векторов. Обучение нейронной сети проводилось путем минимизации функции потерь. Был проведен анализ влияния анизотропии на спиновые конфигурации.

Была рассмотрена система, которая описывается гамильтонианом, включающим в себя обменное взаимодействие, взаимодействие Дзялошинского-Мория, внешнее магнитное поле и анизотропию, представленный в виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - D \sum_{\langle i,j \rangle} [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] - h_z \sum_i S_i^z - A_z \sum_i (S_i^z)^2, \quad (1)$$

где $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный нормированный на единицу вектор спина модели Гейзенберга i -го узла решетки, $J = 1$ – обменный интеграл, определяющий обменное взаимодействие ближайших спинов, h_z – внешнее поле, направленное вдоль оси Oz , D – коэффициент взаимодействия Дзялошинского-Мория, A_z – коэффициент одноосной анизотропии, направленный вдоль оси Oz .



Рис. 1. Схема алгоритма, состоящая из двух полносвязных нейронных слоев (Dense), где слой преобразования в вектор (Flatten), слой преобразования размерности (Reshape), слой нормализации (Normalization)

Для нахождения основного состояния была написана полносвязная нейронная сеть, подробная схема которой представлена на Рис. 1. Нейронная сеть была написана на основе работы [1]. В качестве входных параметров в нейронную сеть передается матрица X размера $[n_b, n]$, представляющая из себя набор векторов размера n , n_b – количество векторов в наборе. Начальная случайная конфигурация проходит через слои нейронной сети, после происходит вычисление функции потерь, представляющей из себя усреднение плотности энергии по n_b . Далее оптимизатором *Adam* находится минимум функции

потерь, происходит нахождение градиентов и обновление весов системы. Визуализация спиновых конфигураций представлена в виде: XY проекции спинов с цветовой шкалой по Z компоненте и проекции спинов по Z компоненте.

Было рассмотрено, способна ли написанная нейронная сеть генерировать целевую спиновую конфигурацию основного состояния без учета анизотропии $A = 0$. Ожидаемые спиновые возбуждения и параметры D и h были взяты из работы [2]. Были получены спиновые конфигурации Рис. 2, Рис. 3, Рис. 4, которые согласуются с ожидаемыми.

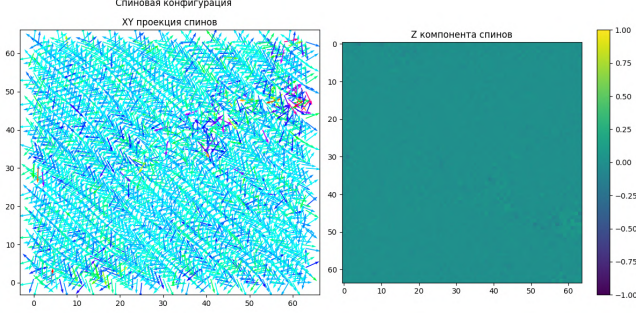


Рис. 2. Конечная спиновая конфигурация спинов с параметрами $h = 0.01$, $D = 2.0$, $A = 0$ (спиральная фаза)

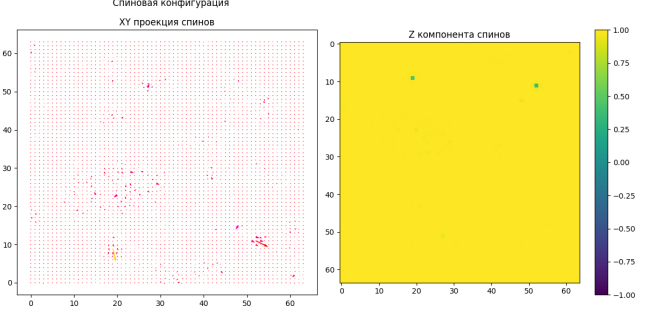


Рис. 3. Конечная спиновая конфигурация спинов с параметрами $h = 0.8$, $D = 0.1$, $A = 0$ (ферромагнитная стенки)

Были сгенерированы спиновые конфигурации со значением параметра анизотропии порядка значения коэффициента обменного взаимодействия $A = 1$. Полученное спиновое возбуждение представлено на Рис. 5.

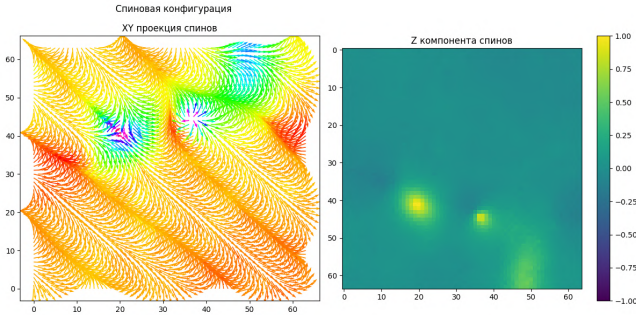


Рис. 4. Конечная спиновая конфигурация спинов с параметрами $h = 0.01$, $D = 0.25$, $A = 0$ (скирмионная фаза)

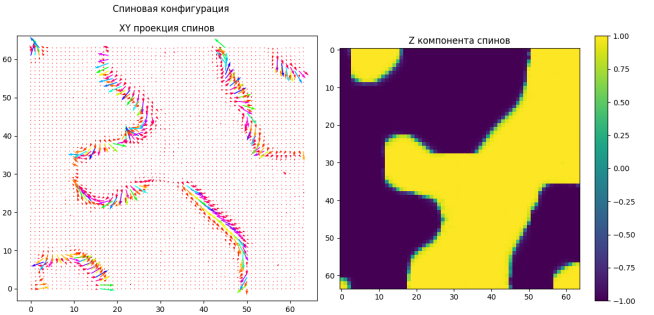


Рис. 5. Конечная спиновая конфигурация спинов с параметрами $h = 0.01$, $D = 0.25$, $A = 1$ (доменные стенки)

На Рис. 4 можем видеть, что в отсутствии анизотропии были получены стабильные скирмионы благодаря доминированию обменного взаимодействия и взаимодействия Дзялошинского-Мория. Однако при значениях анизотропии порядка величины обменного взаимодействия были получены спиновые конфигурации Рис. 5 с явно выраженной доменной структурой, что препятствует образованию скирмионов. Таким образом был сделан вывод о том, что при $A \ll J$ сохраняется скирмионная фаза, а при $A \sim J$ образуются доменные стенки.

[1] H. Y. Kwon, N. J. Kim, C. K. Lee, C. Won, Physical Review B **99**, 024423 (2019)

[2] I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, V. V. Mazurenko, Physical Review B **98**, 174411 (2018)

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРКАЛЯЦИИ ЛИТИЯ В УГЛЕРОДНЫЕ СТРУКТУРЫ

Е.Е. Жойдик*, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

*e-mail: joidik03@gmail.com

В наше время становится важным понимание атомистических процессов при зарядке и разрядке аккумуляторов. Одним из самых востребованных вариантов является литий-ионный аккумулятор, в котором катод представляет собой сложный оксид, а анод состоит из графита или других углеродных наноструктур [1, 2]. Для анализа данных структур применяются первопринципные расчёты на основе метода функционала плотности.

В данной работе был проведён расчёт энергии основного состояния графита с интеркалированным в него литием с помощью программного комплекса VASP. Были рассмотрены три положения лития в углеродной структуре: on-top, bridge, hollow. Вид структуры со всеми вариантами положения лития приведён на рис. 1.

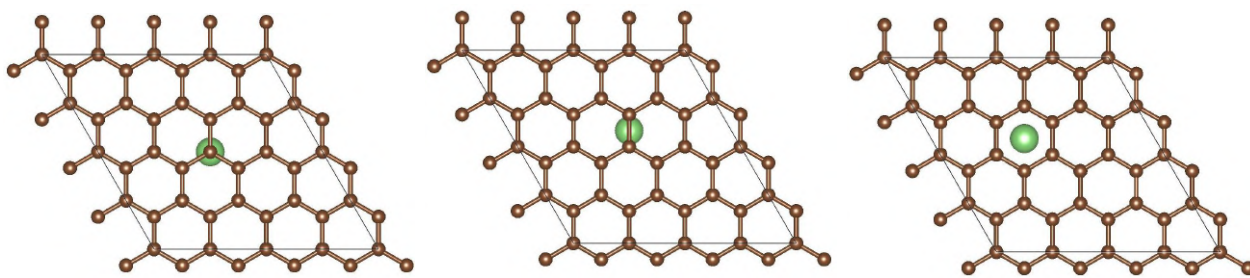


Рис. 1. Три положения лития в углеродной ячейке (слева направо): on-top, bridge, hollow.

Кроме того, в данной работе был проведён анализ Gaussian Approximation Potential (GAP) – метода атомистического моделирования, использующего метод машинного обучения, и изучены инструменты по работе с ним. Подобные инструменты используют для расширения возможностей DFT методов, так как последние ограничены системами сравнительно малых размеров, в то время как реальные структуры представляют собой значительно большие по количеству частиц системы. Кроме того, GAP затрачивает меньше вычислительных ресурсов в сравнении с DFT, сохраняя при этом точность вычисленных значений на достаточно хорошем уровне.

Результаты исследования согласуются с ожиданиями, наиболее выгодным по энергии положением является hollow. В дальнейшем планируется применение GAP при изучении интеркаляции лития в углеродные структуры, в том числе проведение молекулярной динамики с помощью пакета LAMMPS для создания графитовой структуры, близкой к реальным.

- [1] Y. Wu, E. Rahm, R. Holze, J. Power Sources. **114**, 228 (2003)
- [2] V. Etacheri, R. Marom, R. Elazari, G. Salitra, D. Aurbach, Energy Environ. Sci. **4**, 3243 (2011)

РЕАЛИЗАЦИЯ КВАНТОВОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ НА КУДИТНОМ ПРОЦЕССОРЕ

А.А. Минеева^{1,*}, А.Н. Вакилов¹

¹Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

*e-mail: a.mnva@mail.ru

В данной работе представлены результаты вычисления квантового преобразования Фурье (КПФ) для случаев кубитной и кудитной систем. Программные реализации были выполнены с использованием библиотеки для квантовых вычислений Qiskit языка программирования Python.

Для ряда квантовых алгоритмов (алгоритм Шора разложения числа на множители и вычисления дискретного логарифма, квантовый алгоритм оценки фазы для нахождения собственных чисел унитарного оператора и алгоритмы для нахождения скрытой подгруппы) главную роль играет квантовое преобразование Фурье, которое является квантовым аналогом дискретного преобразования [1]. КПФ можно записать следующим образом:

для кубитной цепочки:

$$|j\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i j k / N} |k\rangle, \quad (1)$$

для кудитной цепочки:

$$\begin{aligned} |j\rangle = |j_1 \dots j_n\rangle &\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1=0}^{d-1} \dots \sum_{k_n=0}^{d-1} e^{(2\pi i / d^n) j \sum_{l=1}^n k_l d^{n-l}} |k_1 \dots k_n\rangle = \\ &= \left(\sum_{m=0}^{d-1} e^{2\pi i (0.j_n) m} |m\rangle \right) \dots \left(\sum_{m=0}^{d-1} e^{2\pi i (0.j_1 j_2 \dots j_{n-1} j_n) m} |m\rangle \right). \end{aligned} \quad (2)$$

При рассмотрении системы из 5 кубитов, можно увидеть сильное влияние квантовых шумов и низкую точность вычислений. В таком варианте рассмотрения точность находится в диапазоне 21,9% – 32,1%. При увеличении числа прогонок растет точность вычислений, но это происходит довольно медленно.

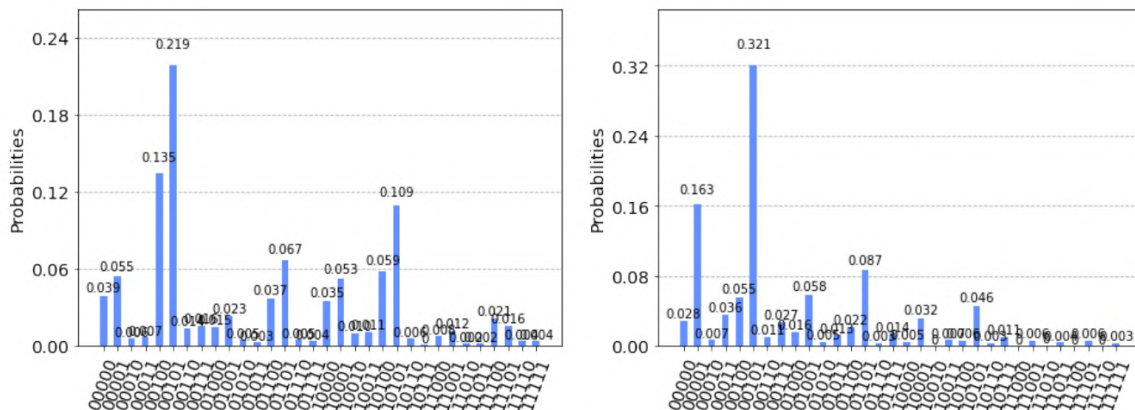


Рис. 1. Вероятности измерения состояний для числа прогонок 1024 и 2048

Достигнутая точность реализации для систем кубитов составляет не более 82,3% (в случае системы из 3-х кубитов). Даже при небольшом увеличении числа кубитов точность значительно падает, что можно заметить на Рис. 1.

Работа с кудитами напрямую не является возможной, поэтому было выбрано кубит-кудитное отображение, которое позволяет выявить оптимальный способ выполнения кубитной цепочки для заданных параметров квантового процессора и доступного набора выполняемых вентилях [2].

При рассмотрении кудитных систем было выявлено, что рост системы практически не влияет на точность вычислений, что обусловлено большей устойчивостью кудитов к шумам и иным внешним факторам.

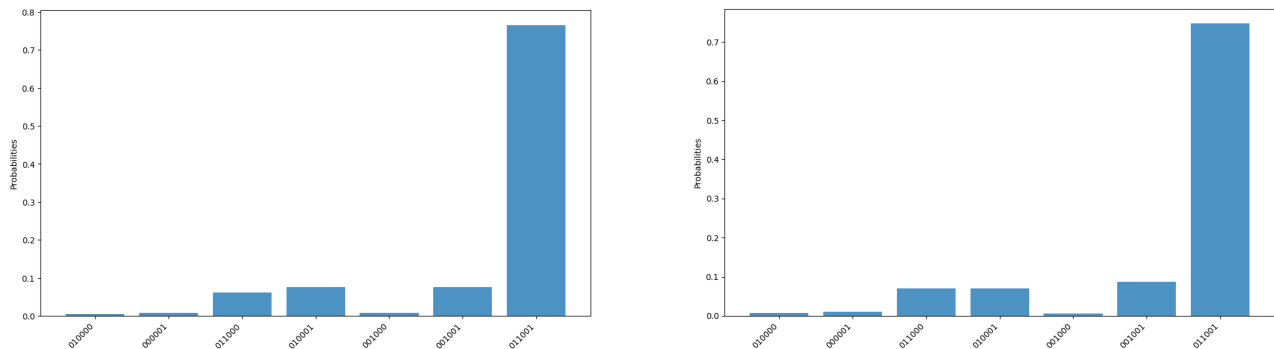


Рис. 2. Вероятности измерения состояний для числа 5, для числа прогонок 1024 и 2048 5-куквартной системы ($d = 4$)

Библиотека Qiskit позволяет рассматривать системы с учетом квантовых шумов, тем самым задавая реальные условия работы таких систем, поэтому в ходе работы была реализована и шумовая модель, которая позволяет получить более корректные результаты.

Можно отметить, что при работе с системой кубитов возникает значительное падение точности и рост квантовых шумов при увеличении системы. Однако при работе с системами кудитов наблюдается относительное сохранение точности даже при увеличении системы.

Это связано с тем, что кудиты в целом могут кодировать больше информации на единицу измерения (снижая нагрузку на оборудование), снижают сложность квантовых схем и повышают эффективность управления. Кудиты могут обеспечить лучшую устойчивость к шуму, отказоустойчивость и коррекцию ошибок[3].

- [1] M.A. Nielsen, I. Chuang, Quantum computation and quantum information (10th Anniversary Edition). – N.Y.: Cambridge University Press (2010)
- [2] A.S. Nikolaeva, E.O. Kiktenko, A.K. Fedorov, EPJ Quantum Technology **11**(2024)
- [3] P. J. Nadkarni, S. S. Garani, Phys. Rev. A. **103**, 042420 (2021)

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ, МАГНИТНЫХ И ОБМЕННЫХ СВОЙСТВ СПЛАВА TiFeS

А.П. Царева*, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077, Омск, Россия

*e-mail: angelinarak77@gmail.com

Соединение TiFeS относится к классу тернарных халькогенидов переходных металлов. В отличие от классических слоистых дихалькогенидов[1], где атомы переходного металла занимают октаэдрические или тригональные позиции в гексагональной решетке, TiFeS представляет собой более сложную систему, часто описываемую как легированный железом сульфид титана или как отдельную тернарную фазу. Атомы серы (S) образуют гексагональную плотноупакованную (ГПУ) решетку. Атомы металлов (Ti и Fe) занимают все октаэдрические пустоты между слоями серы. Одним из методов расчета является спин-поляризованный метод SPR-KKR[2], который позволяет проводить детальнейшие расчеты электронной структуры и магнитных свойств материалов, учитывая их спиновую поляризацию. В данной работе расчёты постоянной решётки и полной энергии сплава TiFeS проводились с помощью метода SPR-KKR в GGA приближении с фиксированной сеткой в 1000 k-точек и сравнивались с результатами расчетов VASP.

Табл. 1. Зависимость полной энергии E_0 и постоянной решётки a от размера k-сетки сплава TiFeS.

k-точки	E_0 (eV)	a (Å)
2	-135.972	5.828
4(20)	-136.024	5.817
6	-136.031	-136.031
8(144)	-136.028	5.820
10	-136.029	5.814
12(468)	-136.029	5.818
1000[SPR-KKR]	-24923.590	5.898

Сходимость по k-сетке в VASP с варьируемым размером k-сетки в диапазоне от $2 \times 2 \times 2$ до $15 \times 15 \times 15$ k-точек.: Результаты расчётов методом VASP[3] демонстрируют явную зависимость от размера k-сетки при малых значениях ($k=2-8$). Наблюдаются значительные колебания как полной энергии системы (E_0), так и постоянной решётки (a). Это указывает на недостаточную сходимость расчётов в этом диапазоне. Начиная с $k=9$, значения энергии и постоянной решётки стабилизируются.

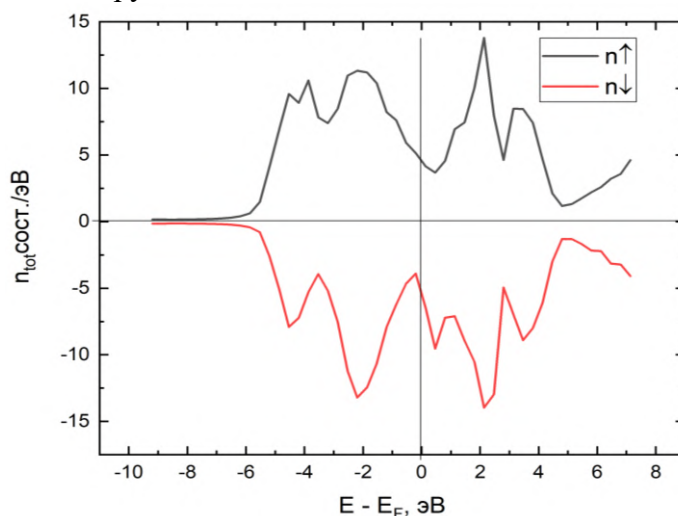


Рис. 1. Плотность энергетических состояний (ПЭС)

Табл. 2. Результаты расчёта магнитных моментов.

Fe	3.4873	2.587[2]
Ti	0.1624	-0.153[2]
S	0.0033	0.032[2]

ПЭС является важной характеристикой для понимания электронных свойств материалов. Она помогает определить, как электроны распределены по энергетическим уровням в материале, что в свою очередь влияет на их проводимость, оптические свойства и другие характеристики. Наличие интенсивных узких пиков вблизи уровня Ферми (особенно в области $-5 \dots -1$ эВ и $1 \dots 5$ эВ) свидетельствует о локализованных d-состояниях переходных металлов (Ti, Fe). Эти пики отражают сильную электрон-электронную корреляцию и возможное формирование квазимолекулярных связей в структуре.

Магнитный момент Fe на порядок превышает момент Ti. Fe обеспечивает общую намагниченности системы. Антиферромагнитный обмен Fe-Fe коррелирует с большим моментом Fe. Ферромагнитный обмен Ti-S не проявляется в моментах из-за слабости Ti и немагнитности S. Магнитные свойства системы определяются подрешеткой железа, что согласуется с сильными антиферромагнитными взаимодействиями Fe-Fe, наблюдаемыми в обменных интегралах. Для практических применений материал можно рассматривать как "железный магнетик" с незначительными добавками Ti.

[1] Han G. H., Duong D. L., Keum D. H., Yun S. J., Lee Y. H. van der Waals Metallic Transition Metal Dichalcogenides. // Chemical Reviews. 2018. V. 118. P. 6297–6336..

[2] Foulkes W. M. C., Mitas, L., Needs R. J., & Rajagopal G. Quantum Monte Carlo simulations of solids.// Reviews of Modern PhysB. 2001. V.73. N33.

[3] Кемпф Л. А., Мамонова М. В. Расчет кристаллической структуры и плотности состояний соединения Fe 0. 33TiS 2 // Молодёжь третьего тысячелетия [Электронный ресурс] : сборник научных статей. Т. 1. Ч. 1. – Омск : Изд-во ОмГУ, 2023. с. 577-579

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ОДНООСНОГО КИРАЛЬНОГО ГЕЛИМАГНЕТИКА НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ ПЛОТНОУПАКОВАННОЙ РЕШЕТКЕ

Д.А. Сергеичева^{1,2}, П.В. Прудников^{1,2}

¹Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644040, Омск, Россия

²Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077, Омск, Россия

*e-mail: SergeichevaDA@stud.omsu.ru

Фаза солитонной решетки (Chiral Soliton Lattice – CSL), возникающая в одноосных киральных гелимагнетиках, привлекает исследователей не только с фундаментальной, но и с практической точки зрения [1]. Благодаря своей устойчивости по отношению к дефектам структуры и высокой чувствительности к изменению величины внешнего поля, магнитные солитоны могут найти применение в квантовых компьютерах [2], устройствах записи и хранения информации [3] и в чувствительных датчиках магнитного поля [1]. Существование устойчивого состояния солитонной решетки в кристаллах с взаимодействием Дзялошинского-Мория (ДМ) было впервые предсказано на основе теории Ландау фазовых переходов второго рода [4]. Зарегистрировать фазу CSL экспериментально удалось лишь в 2012 в результате применения метода лоренцевской микроскопии к кристаллу CrNb_3S_6 [5].

Несмотря на то, что структурные, магнитные и транспортные свойства киральных гелимагнетиков изучаются с 60-х годов XX века [6, 7], многие эффекты, связанные с фазовыми превращениями, всё ещё не ясны [8]. Теоретические и экспериментальные фазовые диаграммы отличаются не только положением границ фаз, но и набором возможных состояний [8, 9]. Более того, для тонкой пластинки кристалла было предсказано расхождение физических свойств с аналогичными характеристиками объемного образца [10].

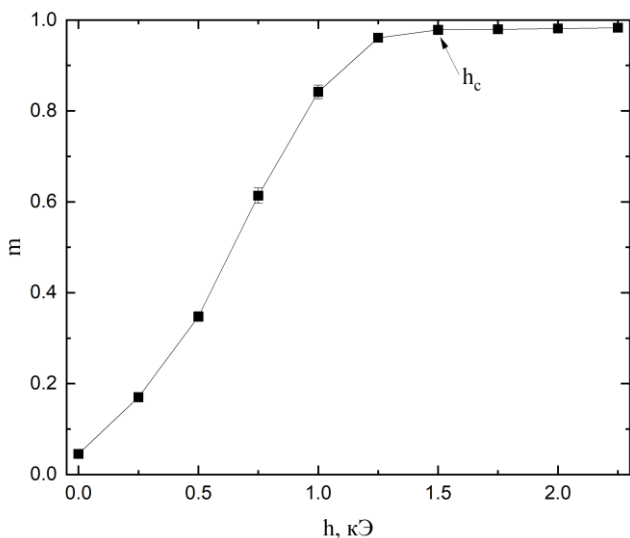


Рис 1. Зависимость намагниченности от внешнего поля. Температура системы $T = 4.2$ К. Критическое поле h_c , соответствует магнитному насыщению системы.

В данной работе был проведен подбор параметров гамильтониана для классической модели Гейзенберга с взаимодействием ДМ на гексагональной плотноупакованной решетке, топология связей в которой является более близкой к структуре кристалла CrNb_3S_6 . В модели была использована экспериментальная температурная зависимость одноионной магнитокристаллической анизотропии [11]. Константы обменного взаимодействия и взаимодействия ДМ были подобраны таким образом, чтобы численная модель воспроизводила следующие экспериментальные значения: температуру перехода в парамагнитное состояние в отсутствие поля, магнитное поле перехода в ферромагнитное состояние и период гелимагнитной фазы [11, 12].

Были определены следующие значения параметров гамильтониана системы: $J_1 = 164$ К, $J_2 = 11.4$ К, $D_2 = 0.92$ К. На рис. 1 представлена зависимость намагниченности системы от внешнего поля при температуре 4.2 К. Величина поля насыщения в основном определяется константой взаимодействия ДМ D_2 . Поле насыщения соответствует 1.5 кЭ [11]. На рис. 2 показана температурная зависимость намагниченности в отсутствие поля. Константа внутрислоевого обменного взаимодействия J_1

определяет положение T_c . Точка перегиба графика соответствует температуре 130 К, что близко к экспериментальному значению – 127 К [11, 12]. Соотношение между D_2 и константой межслоевого обменного взаимодействия J_2 влияет на период гелимагнитной фазы. Период гелимагнитного порядка составляет 47.82(36) нм, что согласуется с 48 нм [12].

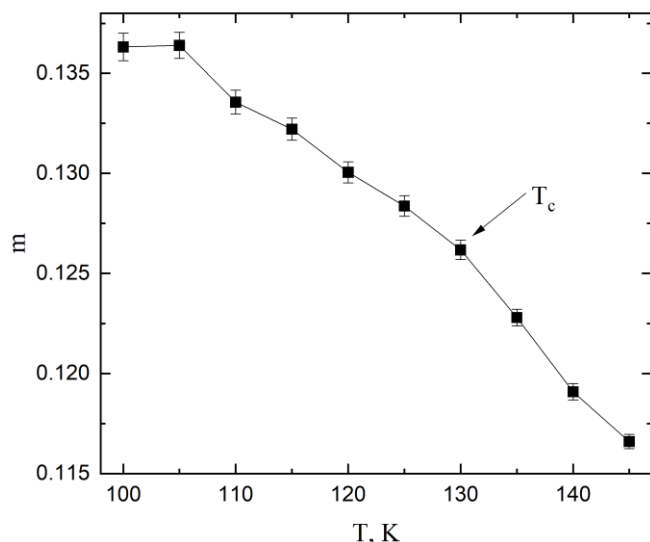


Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности при $h = 0$. Критическая температура T_c соответствует переходу в парамагнитное состояние.

Расчет равновесных магнитных характеристик системы как функций температуры и внешнего магнитного поля позволит построить магнитную фазовую диаграмму для численной модели тонкой пластинки одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 .

[1] Y. Cao, et al., *Materials Today Advances* **7**, 100080 (2020)

[2] J. Zaanen, *Science* **323**, P. 888-890 (2009)

[3] J. Sampaio, et al, *Nat. Nanotechnol* **8**, P. 839-844 (2013)

[4] I. Dzyaloshinskii, *Sov. Phys. JETP*. **19(4)**, P. 960-971 (1958)

[5] Y. Togawa, et al, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 107202 (2012)

[6] T. Nagamiya, *Solid St. Phys.* **20**, P. 305-411 (1968)

[7] A. S. Ovchinnikov, J. Kishine, *Solid State Phys.* **66** (2015)

[8] E. Clements, et al, *Sci. Rep.* **7(1)**, 6545 (2017)

[9] A. Bykov, et al, *J. Solid. St. Chem.* **322**, 123951 (2023)

[10] Y. Togawa, et al, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 017204 (2019)

[11] T. Miyadai, et al, *J. Phys. Soc. Jpn.* **52(4)**, P. 1394-1401 (1983)

[12] L. Wang, et al, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 257203 (2017)

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ПОВЕРХНОСТИ СТАЛИ У8 ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИОННЫМ ПУЧКОМ

А.С. Витершпан*, Т.В. Панова, В.С. Ковивчак

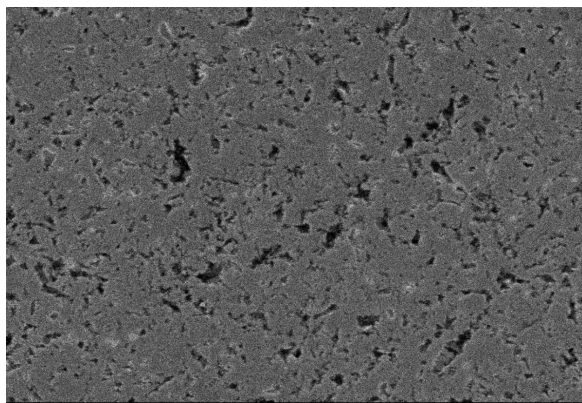
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

*e-mail: vritershpan95@mail.ru

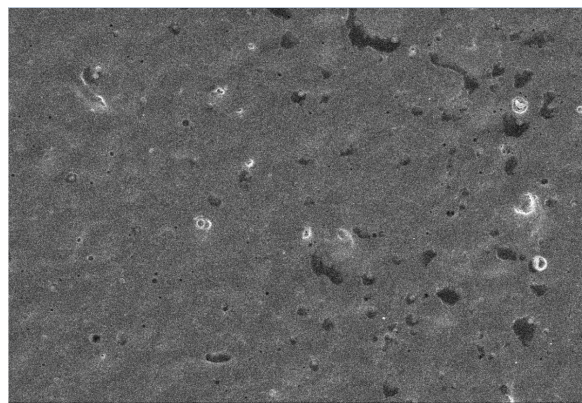
Инструментальная углеродистая сталь У8 широко применяется в производстве инструментов и деталей, требующих высокой твёрдости и износостойкости. Однако её недостатки, такие как хрупкость, низкая коррозионная стойкость и склонность к трещинообразованию, ограничивают область использования. Одним из эффективных способов улучшения характеристик данной стали являются пучковые технологии — воздействие лазерного, электронного или ионного излучения на приповерхностные слои материала.

Целью настоящей работы является изучение влияния облучения ионами углерода и водорода на структурные и фазовые характеристики стали У8. Облучение проводилось в вакуумной камере с использованием источника ионов углерода и водорода при следующих условиях: энергия ионов — 250 кэВ, плотность тока — 150 А/см², длительность импульса — 60 нс, интервал между импульсами — 5 с, количество импульсов — 3.

Для оценки морфологических изменений поверхности после облучения были проведены исследования методом сканирующей электронной микроскопии (SEM), результаты которого представлены на рис.1. На изображении 1(а) представлена морфология необлучённой поверхности стали У8. Видны характерные полости, свидетельствующие о несплошности исходной поверхности. После облучения (рис.1(б)) наблюдается оплавленная поверхность с образовавшимися кратерами ~ 5 мкм.



(а)



(б)

Рис. 1. SEM-изображения поверхности стали У8 в необлученной зоне (а) и в центре пятна ионного воздействия (б)

Рентгеноструктурный анализ (рис.2) показали смещение пиков в сторону больших углов после ионной обработки, что свидетельствует об уменьшении параметра решётки. Анализ фазового состава показал, что в облучённом образце основной фазой является обедненная углеродом ферритная (α -Fe) фаза и появляются дополнительные пики в области $2\theta \approx 43 - 45^\circ$ могут быть связаны с формированием метастабильных фаз, таких как мартенсит или мелкодисперсный цементит (Fe_3C).

С целью объяснения структурно-фазовых превращений в исследуемой стали были проведены теоретические расчёты проникновения ионов в материал с помощью программы SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter([1, 2])). Были смоделированы проективные

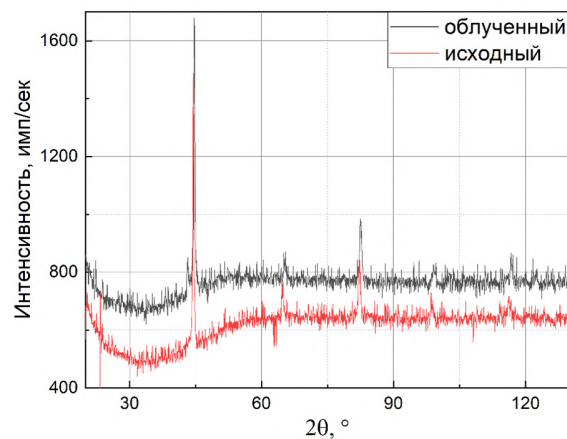


Рис. 2. Дифрактограмма стали У8 до и после облучения

пробеги и распределения энерговыделения при облучении стали У8 ионами водорода и углерода. На графике зависимости проективного пробега от энергии ионов (рис. 3) видно, что с ростом энергии частицы проникают глубже в материал. При энергии 250 кэВ, соответствующей экспериментальным условиям, пробег ионов углерода составляет около 0,275 мкм, тогда как водород проникает существенно глубже — вплоть до 1,08 мкм.

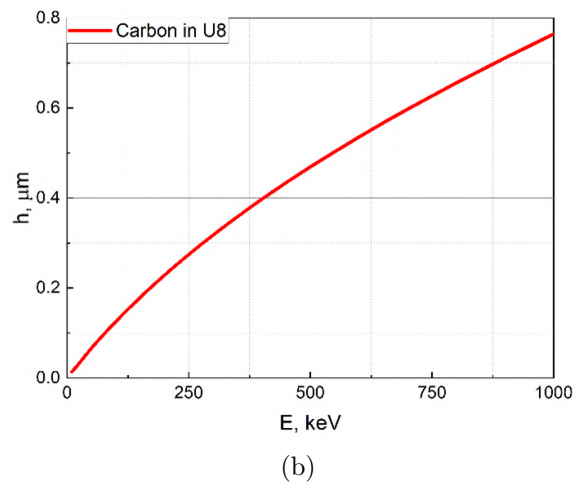
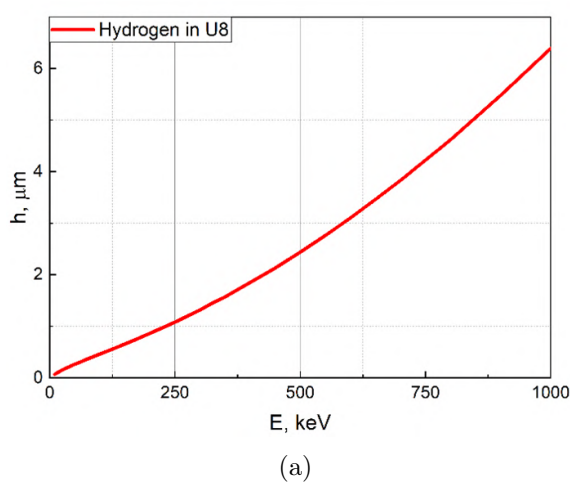


Рис. 3. Зависимость проективного пробега от энергии ионов водорода (a) и углерода (b) при облучении стали У8

Полученные расчёты свидетельствуют о том, что максимум энерговыделения приходится на узкий поверхностный слой, который плавится и частично испаряется. В результате отвода тепла в глубь образца происходит перераспределение углерода с образованием более твердых фаз.

Таким образом, проведенные исследования показали, что воздействие мощного ионного пучка на сталь У8 приводит к существенному перераспределению углерода, что способствует формированию на поверхности твердых фаз цементита и мартенсита.

- [1] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, M.D. Ziegler, The stopping and range of ions in matter, SRIM Co, (2008)
- [2] SRIM (моделирование процессов ионной имплантации.), URL: www.srim.org

Расчет адгезионных и триботехнических характеристик для металлических поверхностей методом диэлектрического формализма

Е.С. Гоман, М.В. Мамонова*

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077, Омск, Россия

*e-mail: MamonovaMV@omsu.ru

В данной работе, по исследованию адгезионных и триботехнических характеристик материалов для систем Стирлинга, рассматривается задача определения влияния материалов на сцепление, износ и трение в условиях контактной пары металл–металл и металл–диэлектрик/полупроводник. Объекты исследования включают переходные металлы и их соединения (нитриды и карбиды) в сочетании со сталью марки 30X13 и медью. В рамках диэлектрического формализма, как отмечалось в теоретическом обзоре [1], расчеты с применением программного комплекса [2] проводятся на основе диэлектрической функции материалов и параметров электронной структуры, что позволяет аппроксимировать вклад дисперсионных сил, электростатических взаимодействий и возможные химические связи на межфазной границе. В качестве исходных условий применяются данные о плазменных частотах, ширине запрещенной зоны, диэлектрической проницаемости и концентрации носителей заряда, полученные из справочных таблиц и литературных источников [3-4], что позволяет получить теоретические зависимости энергии адгезии и силы адгезии от расстояния между поверхностями.

Расчет энергии адгезии осуществляется по формуле, связывающей спектр поверхностных плазменных колебаний и параметры материалов при малых зазорах. Энергия адгезии определяется как разность значений энергий поверхностных плазменных колебаний на двух гранях, расположенных на расстояниях h и бесконечности, что отражает вклад виртуального обмена энергетическими состояниями между поверхностями. При этом для металл–металл взаимодействий ключевую роль играет плазменная частота и концентрация валентных электронов, которые могут быть вычислены через валентность ионов металла, молярную массу и плотность. При отсутствии точных значений плазменных частот используются экспериментальные коэффициенты постоянной Холла и связанные параметры.

Из полученных в результате расчета значений следует, что энергия адгезии для большинства пар металлов и их соединений с подложкой оказывается значительной на больших зазорах, что говорит о прочном сцеплении и возможности повышения прочности узлов трения в системах Стирлинга. Однако для нулевых зазоров характерно резкое возрастание силы адгезии, что указывает на усиление межатомного взаимодействия при непосредственном контакте. В реальных условиях шероховатости поверхности и наличие оксидных пленок приводят к тому, что фактическая сила сцепления может оказаться ниже верхних пределов, получаемых при $h \rightarrow 0$. Таким образом, исследование демонстрирует баланс между прочностью адгезионного сцепления и возможностью повышенного трения в некоторых режимах работы. Отмечены преимущества самосмазывающихся материалов: при умеренных значениях энергии адгезии они обеспечивают низкий коэффициент трения, что особенно важно в вакууме и при высоких температурах. Нитриды и карбиды переходных металлов представлены как оптимальные варианты в большинстве случаев, сочетая достаточно высокую адгезию со сталью 30X13 и при этом обладая сниженным коэффициентом трения в определённых условиях.

Расчеты показывают, что более прочное сцепление усиливает износостойкость, снижая риск отслаивания покрытия, но может вести к увеличению коэффициента трения в сухом трении. Гипотеза о разумной оптимизации состава и многослойной структуры материалов подтверждается тем, что нитриды и карбиды, а также сочетания TiN, MoS₂ и подобных материалов позволяют достичь оптимальных характеристик покрытия. Таким образом, на практике выбор материалов определяется балансом между прочностью адгезии,

коэффициентом трения, термической и коррозионной стойкостью, стоимостью и технологической сложностью нанесения.

Полученные данные свидетельствуют о потенциальной применимости диэлектрического формализма для прогноза адгезионных и триботехнических характеристик в системах Стирлинга. На практике это означает возможность подбора композиционных покрытий и многослойных структур для повышения долговечности регенераторов, поршней и уплотнений, а также повышения теплопередачи и снижения трения в контактных узлах. Можно заключить, что расчет параметров контактирующих поверхностей, произведенный на основе диэлектрического формализма, обеспечивает теоретическую базу для выбора оптимальных материалов в узлах трения систем Стирлинга и способствует прогрессу в проектировании износостойких покрытий.

- [1] Мамонова М.В., Прудников В.В., Прудникова И.А. Теоретические и экспериментальные методы в физике поверхности: учебное пособие – Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та, 2009. – 554 с.
- [2] Пакет прикладных программ Лаборатория Прикладной Теоретической Физики и Параллельных Вычислений ОмГУ, Омск, 2003 г.
- [3] Свойства, получение и применение тугоплавких соединений: справочник // под ред. Т. Я. Косолаповой. М.: Металлургия, 1986.
- [4] Физические величины: справочник / под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мелихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО ПОВЕДЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

А.В. Ейхлер^{1,*}, П.В. Прудников^{2,1}

¹ Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644065, Омск, Россия

² Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644040, ул. Нефтезаводская 54, Омск, Россия

*e-mail: alexey987@bk.ru

Динамическое поведение неравновесных систем описывает широкий спектр физических явлений. Такие системы претерпевают изменения своего состояния с течением времени под воздействием внешних сил [1] [2]. Динамический фазовый переход в магнитных пленках характеризуется переходом из динамически упорядоченной фазы в динамически неупорядоченную [3], а в точке фазового перехода сильным откликом на внешнее воздействие [4]. Теоретические и экспериментальные работы показывают, что существует возможность управления параметрами порядка таких структур.

В данной работе проводились исследования неравновесного поведения динамического фазового перехода в анизотропной модели Гейзенберга. Численное исследование проводилось с помощью методов Монте-Карло для тонкой магнитной пленки. Целью моделирования было исследование эффектов памяти в нашей системе. Нами были рассчитаны петли гистерезиса в области фазового перехода $t_{1/2} \approx t_{1/2}^c$ Рис.1(b,d) и ниже $t_{1/2}^c$ Рис.1(a,c). Так же были получены данные для релаксационных процессов в гистерезисных эффектах, которые влияют на смещение точки фазового перехода.

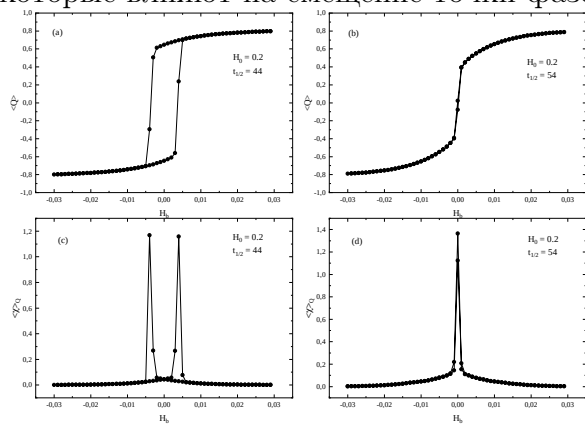


Рис. 1. Эффекты гистерезиса представлены для $Q(H_b)$ при $t_{1/2} < t_{1/2}^c = 44$ MCS/c, случай (a) и $t_{1/2} = t_{1/2}^c = 54$ MCS/c, случай (c). Результаты о восприимчивости соответствуют поведению $Q(H_b)$ в случае (c) к случаю (a), случай (d) к случаю (b). Пик восприимчивости в случае (d) указывает на фазовый переход второго рода при $t_{1/2} = 54$.

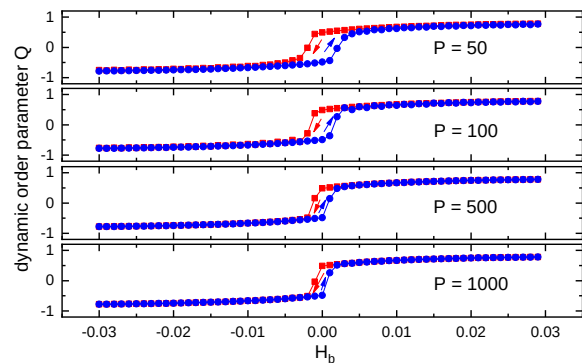


Рис. 2. На графиках представлено изменение петли гистерезиса относительно поля смещения H_b при увеличении количества циклов осцилляций влияния осциллирующего поля $H(t)$

Проведено численное моделирование динамического фазового перехода во внешнем осциллирующем поле моделью Гейзенберга с помощью методов Монте Карло. Рассчитаны изменения петель гистерезиса при увеличении полупериода поля Рис.1(a,b). Показано поведение, характерное для фазового перехода первого рода при низких полупериодах

Рис.1(a) и фазового перехода второго рода при высоких Рис.1(b). Изменение времени релаксации параметра порядка приводит к сужению петли гистерезиса Рис.2, что отражается на типе фазового перехода и подтверждается экспериментально. Получены картины фазового превращения динамического фазового перехода. Выявлено смещение фазового перехода при увеличении амплитуды поля, что согласуется с результатами эксперимента

- [1] S. Pleuksachat, P. Krabao, S. Pongha et al., Journal of Energy Chemistry, 71, 452–459, (2022).
- [2] C. E. Woodward, M. Campion, D. J. Isbister, The Journal of Chemical Physics, 116(7), 2983–2990, (2002)
- [3] T. Tomé, M. J. de Oliveira, Physical Review A, 41(8), 4251–4254, (1990).
- [4] D. T. Robb, Y. H. Xu, O. Hellwig et al., Physical Review B, 78(13), 134422, (2008).