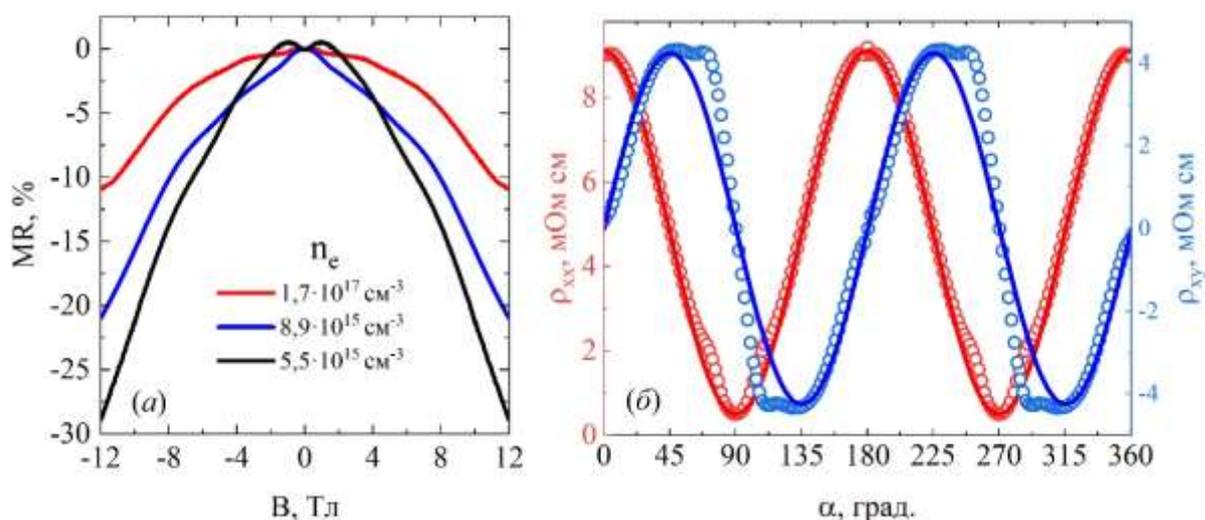


## Результаты исследований ИФМ УрО РАН 2023 года, имеющие высокую значимость

### Наиболее важные результаты по теме «ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ, СПЛАВОВ, ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ, ОПРЕДЕЛЯЕМЫЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРОЙ И МЕЖЭЛЕКТРОННЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ»

1.1 В немагнитном изотропном селениде ртути обнаружены два магнитотранспортных эффекта, которые индуцируются киральной аномалией. Первый эффект – киральный магнитный эффект, который наблюдается в магнитном поле, направленном вдоль электрического тока. Он проявляется в виде положительной продольной магнитопроводимости (отрицательного магнитосопротивления) без тенденции к насыщению, имеющей квадратичную зависимость от магнитного поля. Второй эффект – планарный эффект Холла, который наблюдается в направлении перпендикулярном направлению электрического тока (планарная конфигурация). Он имеет вид осциллирующей зависимости холловского и планарного магнитосопротивления от угла поворота образца в магнитном поле. Причем, амплитуда эффекта в ультрачистом монокристаллическом HgSe на порядки превышает амплитуду планарного эффекта Холла в известных топологических материалах. Одновременное наблюдение этих эффектов является весомым аргументом в пользу топологической природы электронного спектра HgSe.



Символы – эксперимент, сплошные линии – подгонка с помощью формул для планарного эффекта Холла. (а) – Магнитолевая зависимость относительного продольного магнитосопротивления  $MR$  в HgSe при температуре 150 К для образцов с разной концентрацией электронов  $n_e$ . (б) – Угловая зависимость планарного эффекта Холла  $\rho_{xy}$  и планарного магнитосопротивления  $\rho_{xx}$  в магнитном поле 10 Тл при температуре 150 К для ультрачистого образца HgSe с  $n_e = 5,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ .

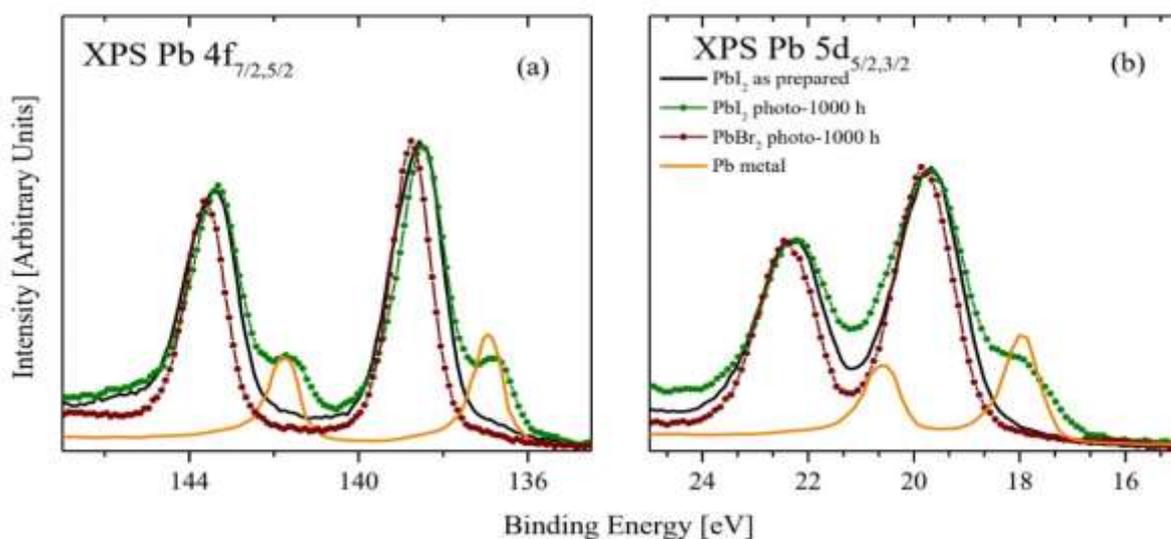
Рисунок 1.1 – Магнитотранспортные проявления киральной аномалии в HgSe

Результаты опубликованы в 2023 году:

Lonchakov, A.T. [Positive longitudinal magnetoconductivity induced by chiral magnetic effect in mercury selenide](#) / A.T. Lonchakov, S.B. Bobin. – Текст: непосредственный // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2023. — V. 35. — P. 65501—65508.

Bobin, S.B. [Giant Planar Hall Effect in an Ultra-Pure Mercury Selenide Single Crystal Sample](#) / S.B. Bobin, A.T. Lonchakov. – Текст: непосредственный // JETP Letters. — 2023. — V. 118. — P. 495—501.

1.2 Фотохимическая деградация галогенидов свинца  $\text{PbI}_2$  и  $\text{PbBr}_2$ , используемых при синтезе перовскитных солнечных элементов, исследовалась методами оптической и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) и первопринципных зонных расчетов. Установлено, что для  $\text{PbI}_2$  после 200 ч светового облучения наблюдается значительное снижение оптического поглощения и выделение металлического свинца, что указывает на фотохимическую деградацию этого галогенида вследствие разложения на Pb-металл и газообразный йод:  $\text{PbI}_2 \rightarrow \text{Pb} + \text{I}_2^\uparrow$ . С другой стороны, обнаружено, что оптические и XPS спектры  $\text{PbBr}_2$  не изменяются до 1000 часов воздействия видимого света. Согласно расчетам методом теории функционала плотности, энергии образования металлических и галогенидных вакансий для  $\text{PbBr}_2$  оказались выше, чем для  $\text{PbI}_2$ , что подтверждает его более высокую устойчивость к облучению видимым светом. Полученные результаты позволяют рекомендовать использовать избыток  $\text{PbBr}_2$  в прекурсорах  $\text{MAPbI}_3$  ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ) не только для уменьшения плотности дефектов и увеличения времени жизни и эффективности носителей, но также для повышения фотохимической стабильности перовскитных солнечных элементов.



(а) до и (б) после облучения видимым светом в течение 1000 часов, демонстрирующий исчезновение фотохимической деградации для  $\text{PbBr}_2$ .

Рисунок 1.2 – XPS Pb 4f (а) Pb 5d (б) основных уровней  $\text{PbI}_2$  и  $\text{PbBr}_2$

Результаты опубликованы в 2023 году:

[The Photochemical Stability of  \$\text{PbI}\_2\$  and  \$\text{PbBr}\_2\$ : Optical and XPS and DFT Studies](#) / I.S. Zhidkov, A.F. Akbulatov, A.I. Poteryaev, A.I. Kukharenko, A.V. Rasmetyeva, L.A. Frolova, P.A. Troshin, E.Z. Kurmaev. – Текст: непосредственный // *Coatings*. — 2023. — V. 13. — P. 784—791.

1.3 Представлены результаты исследований спиновых состояний трехвалентных ионов кобальта в монокристаллическом кобальтите  $\text{LaCoO}_3$  с помощью рентгеновских фотоэлектронных,  $\text{Co } L_{2,3}$ - и  $\text{O } K$ -рентгеновских абсорбционных, а также  $\text{Co } K\beta_{1,3}$ -рентгеновских эмиссионных спектров. Показано, что при комнатной температуре в объеме монокристалла  $\text{LaCoO}_3$  ионы  $\text{Co}^{3+}$  находятся в низкоспиновом состоянии, а на поверхности  $\text{LaCoO}_3$  присутствуют высокоспиновые ионы  $\text{Co}^{2+}$ , высокоспиновые ионы  $\text{Co}^{3+}$ , низкоспиновые ионы  $\text{Co}^{3+}$  и, вероятно, также промежуточно-спиновые ионы  $\text{Co}^{3+}$ .

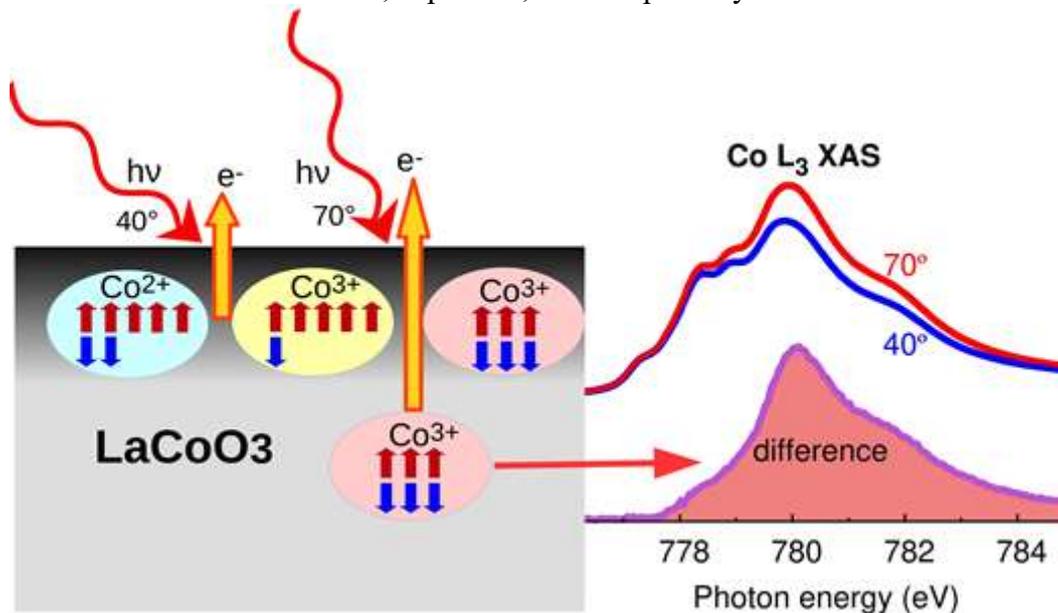


Рисунок 1.3 — Модель расположения двухвалентных и трехвалентных ионов кобальта с различными спинами на поверхности и в объеме кобальтита  $\text{LaCoO}_3$  и экспериментальные рентгеновские абсорбционные  $\text{Co } L_{2,3}$ -спектры

Результаты опубликованы в 2023 году:

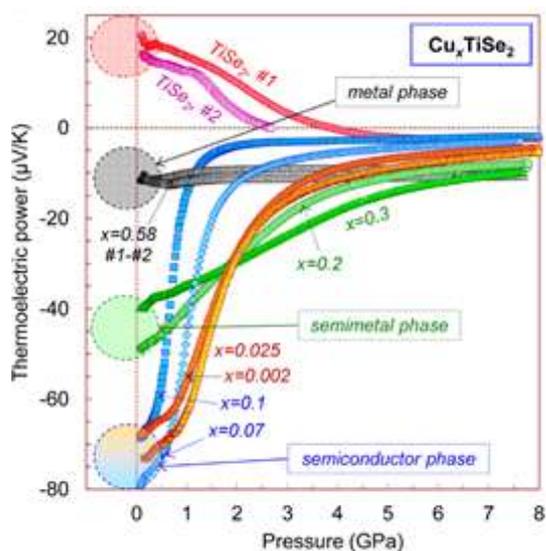
[Spin States of Cobalt Ions in the Bulk and on the Surface of  \$\text{LaCoO}\_3\$  Probed by X-ray Absorption, Emission, and Photoelectron Spectra](#) / V. R. Galakhov, M. S. Udintseva, D. A. Smirnov, A. A. Makarova, K. Kuemper. – Текст: непосредственный // JETP Letters. — 2023. — V. 118. — P. 189—194.

1.4 Получены экспериментальные данные о влиянии высокого давления (до 10 ГПа) на электронные транспортные свойства монокристаллов  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$  ( $0 \leq x < 0.6$ ). В монокристалле  $\text{TiSe}_2$  наблюдался обратимый фазовый переход в металл выше 4 ГПа, сопровождающийся  $p$ - $n$ -инверсией типа проводимости. Установлено, что при нормальных условиях интеркалированные монокристаллы  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$  ( $0 \leq x < 0.6$ ) обладают различными электронными состояниями (полупроводник, полуметалл, металл) в зависимости от содержания меди. Так, кристаллы с  $x \leq 0.1$  являются полупроводниками с узкой запрещенной зоной ( $E_g$ ) равно около (40-50) мэВ. В данных кристаллах выявлен обратимый и хорошо воспроизводимый при циклическом сжатии под давлением переход полупроводник-металл, причём давление перехода варьировалось в диапазоне (1–3) ГПа, в зависимости от содержания меди. Также установлено, что кристаллы  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$  с  $x=0.2$  и  $x=0.3$  являются полуметаллами и переходят в металлическое состояние при (4-5) ГПа, а кристаллы с  $x=0.58$  обладают металлической проводимостью во всем исследованном диапазоне давлений. Полученные результаты указывают на потенциальную возможность применения кристаллов  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$  в электромеханических микроустройствах.

Результаты опубликованы в 2023 году:

[Controlling the semiconductor–metal transition in Cu-intercalated  \$\text{TiSe}\_2\$  by applying stress](#) / N.V. Morozova, A.Yu. Usik, I.V. Korobeinikov, A.N. Titov, S.V. Ovsyannikov. – Текст: непосредственный // Journal of Materials Chemistry C. — 2023. — V. 11. — P. 6071–6081.

[Термоэлектрические свойства интеркалатных кристаллов  \$\text{Cu}\_x\text{TiSe}\_2\$  \( \$x = 0.025, 0.58\$ \) под давлением до 10 ГПа](#) / А.Ю. Усик, Н.В. Морозова, И.В. Коробейников, А.Н. Титов. – Текст: непосредственный // Физика твёрдого тела. — 2023. — V. 65. — P. 1869–1873.



Кружками обозначены электронные состояния образцов при атмосферном давлении: металлы, полуметаллы и полупроводники.

Рисунок 1.5 – Зависимости термоЭДС от давления для двух кристаллов  $\text{TiSe}_2$  (обозначенных #1 и #2) и кристаллов  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$  при 295 К

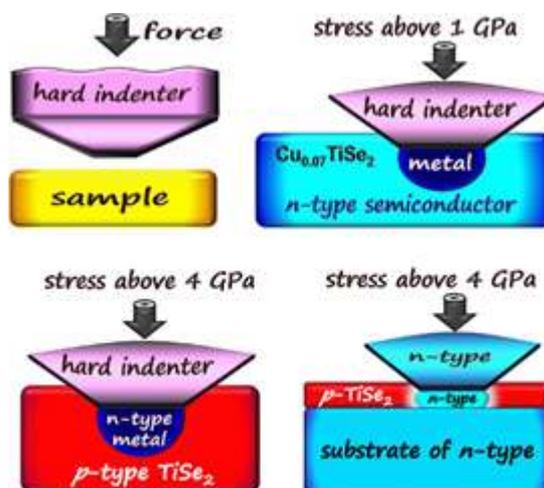


Рисунок 1.6 – Пример возможного применения перехода полупроводник-металл в структурах на основе интеркалированных кристаллов  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$

1.5 В условиях высокого давления и высоких температур синтезированы моно- и поликристаллы оксида железа  $\text{Fe}_4\text{O}_5$ , обладающие структурой типа  $\text{CaFe}_3\text{O}_5$ , состоящей из линейных цепочек железа с октаэдрической и тригонально-призматической координацией кислорода. С применением ряда экспериментальных методов (измерение удельного электросопротивления, эффекта Холла, термоЭДС, БИК спектроскопия, монокристаллическая рентгеновская дифракция) исследованы электронные свойства данного оксида со смешанной валентностью в условиях атмосферного давления и внешнего приложенного давления до 20 ГПа. В нормальных условиях монокристаллы  $\text{Fe}_4\text{O}_5$  демонстрировали полуметаллическую электропроводность с почти равными парциальными вкладами от электронов и дырок, что соответствует средней степени окисления железа  $\text{Fe}^{2.5+}$ . Этот вывод предполагает, что как октаэдрические, так и тригонально-призматические катионы железа вносят вклад в механизм прыжковой поляронной проводимости между ионами  $\text{Fe}^{2+}$  и  $\text{Fe}^{3+}$ . Полученные результаты могут внести вклад в исследование электронных свойств других недавно открытых оксидов железа с нетрадиционной стехиометрией, многие из которых не могут существовать при атмосферном давлении.

Результаты опубликованы в 2023 году

[Electronic properties of single-crystalline  \$\text{Fe}\_4\text{O}\_5\$](#)  / S.V. Ovsyannikov, A.E. Karkin, I.V. Korobeinikov, N.V. Morozova, M. Bykov, E. Bykova, L. Dubrovinsky. – Текст: непосредственный // DALTON TRANSACTIONS. — 2023. — V. 52. — P. 5563—5574].

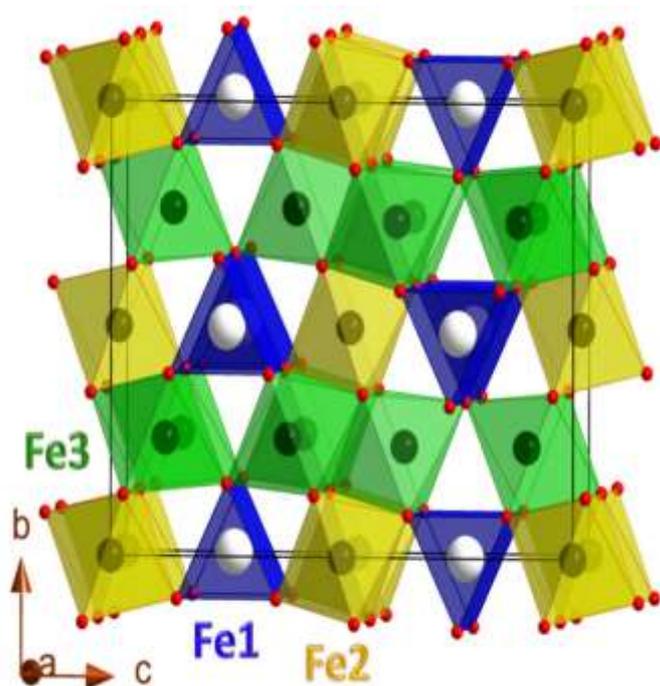


Рисунок 1.7 – Кристаллическая структура  $\text{Fe}_4\text{O}_5$ .

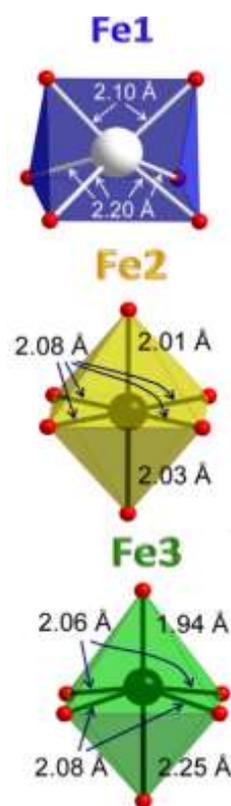


Рисунок 1.8 – Тригонально-призматическая и октаэдрические кислородные координация атомов Fe1, Fe2 и Fe3 в этой структуре с указанием расстояний Fe–O

Наиболее важные результаты по теме «ТЕОРИЯ МАГНЕТИЗМА, СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТОВ В ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ И СОЕДИНЕНИЯХ НА ИХ ОСНОВЕ С УЧЕТОМ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ РЕШЕТОЧНОЙ И СПИНОВОЙ СТРУКТУРЫ»

2.1 С помощью первопринципных расчётов найден новый сверхпроводящий материал на основе золота — силванит  $\text{AuAgTe}_4$ . Установлен структурный фазовый переход при 5 ГПа из моноклинной фазы ( $P2/c$ ) в фазу высокого давления  $P2/m$ . Продемонстрировано резкое увеличение плотности электронных состояний на уровне Ферми с ростом давления. Установлено, что при фазовом переходе димеры Te не сохраняются, что приводит к качественному изменению электронной структуры. При помощи моделирования дисперсионных кривых доказана динамическая стабильность обеих фаз в соответствующих интервалах давления. Анализ рассчитанных зависимостей изотропной спектральной функции Элиашберга и константы электрон-фононного взаимодействия от давления показал, что низкоэнергетические фононные моды вносят доминирующий вклад в электрон-фононное взаимодействие. Оценка зависимости температуры сверхпроводимости от приложенного давления согласуется с экспериментальными результатами. Показано, что установленная тенденция к зарядовому диспропорционированию может играть решающую роль в формировании куперовских пар и появлению сверхпроводимости под давлением, разрушение димеров Te при фазовом переходе имеет второстепенное значение. Расшифровка спектров комбинационного рассеяния света выше 8 ГПа с помощью результатов моделирования динамики решётки говорит о появлении локального структурного беспорядка при высоком давлении. Механизм установления сверхпроводимости, предложенный для  $\text{AuAgTe}_4$ , может быть реализован и в других соединениях на основе Au и дихалькогенидах переходных металлов и дополняет современное теоретическое понимание механизма сверхпроводимости в этом классе веществ.

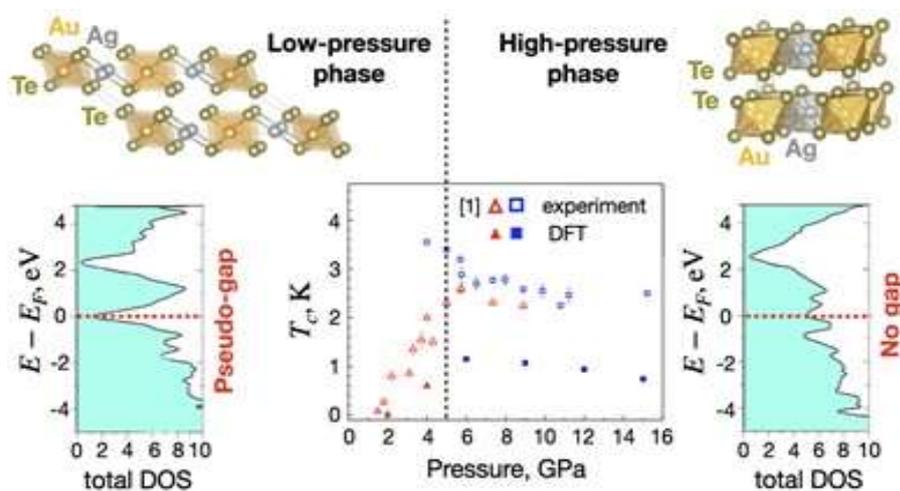


Рисунок 2.1 — Структура, плотность электронных состояний и рассчитанная в DFT температура сверхпроводимости для  $\text{AuAgTe}_4$ .

Результаты опубликованы в 2023 году:

[Silvanite  \$\text{AuAgTe}\_4\$ : a rare case of gold superconducting material/](#) Y. Amiel, G.P. Kafle, E.V. Komleva, E. Greenberg, Yu. S. Ponosov, S. Chariton, B. Lavina, D. Zhang, A. Palevski, A.V. Ushakov, H. Mori, D.I. Khomskii, I.I. Mazin, S.V. Streltsov, E.R. Margine, G. Kh. Rozenberg. – Текст: непосредственный // *Journal of Materials Chemistry C*. — 2023. — V. 11. — P. 10016—10024.

[Pressure-Induced Reversible Local Structural Disorder in Superconducting  \$\text{AuAgTe}\_4\$  /](#) D.A. Zamyatin, E.A. Pankrushina, S.V. Streltsov, Y.S. Ponosov. – Текст: непосредственный // *Inorganics*. — 2023. — V. 11. — P. 99—110.

2.2 С помощью различных подходов исследовано формирование магнитного упорядочения в модели Хаббарда для различных решеток. Особое внимание уделяется влиянию корреляционных эффектов и магнитного фазового расслоения на электронные и магнитные свойства, а также на величину и температурную зависимость магнитокалорического эффекта. Аналитически показано в рамках новой теории Ландау с переменным числом частиц, что фазовая восприимчивость для фаз, участвующих в магнитном фазовом расслоении, имеет противоположный знак, что может объяснять аномалии магнитокалорического эффекта для материалов, испытывающих фазовый переход первого рода [3-5]. На рисунке 2.2 показано два варианта: в нулевом (конечном (в энергетических единицах)  $h = 0.001t$ ) магнитном поле  $h$ , где  $t$  интеграл переноса. AFM — антиферромагнитная, PM — парамагнитная, Fi — скошенная антиферромагнитная фаза.  $\Phi 1 + \Phi 2$  — обозначает фазовое расслоение с участием фаз  $\Phi 1, \Phi 2$ .

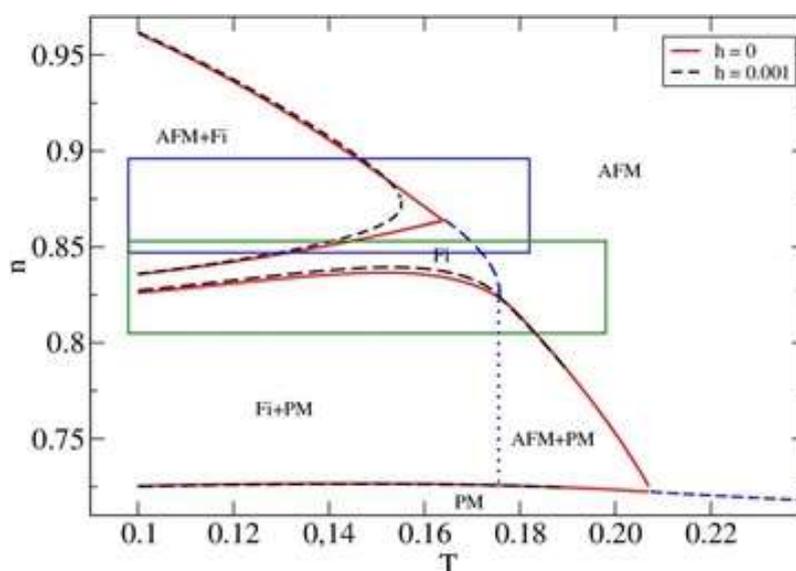


Рисунок 2.2 – Фазовая диаграмма модели Хаббарда для квадратной решетки в приближении ближайших соседей при  $U = 4t$  в переменных температура ( $T$ ) - концентрация ( $n$ )

Результаты опубликованы в 2023 году:

Igoshev, P.A. [Giant kinks in the entropy change temperature dependence of the magnetocaloric effect in layered phase-separated metals](#) / P.A. Igoshev, L.N. Gramateeva, A.V. Lukoyanov. – Текст: непосредственный // Physical chemistry chemical physics. — 2023. — V. 25. — P. 6995—7002.

Irkhin, V. Yu. [Hubbard Bands and Exotic States in Doped and Undoped Mott Systems: The Kotliar–Ruckenstein Representation](#) / V. Yu. Irkhin. – Текст: непосредственный // Condensed Matter. — 2023. — V. 8. — P. 75—87.

Igoshev, P.A. [Magnetocaloric Effect and Phase Separation: Theory and Prospects](#) / P.A. Igoshev. – Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography. — 2023. — V. 124. — P. 1112—1120.

2.3 На основе интегро-дифференциального уравнения магнитостатики поставлены и решены две линейные задачи о вычислении компонент результирующего магнитного поля для тел с цилиндрической симметрией при условии намагничивания источником внешнего поля заданной конфигурации. Одно из тел представляет из себя бесконечно протяжённую трубу с вытянутым вдоль оси протяжённости дефектом так, что перпендикулярное сечение тела остаётся неизменным вдоль этой оси. Другое тело – полубесконечный цилиндр. Обе задачи решались при условии постоянства магнитной проницаемости. Разработаны алгоритмы решения, составлены компьютерные программы. Результаты опубликованы в 2023 году в журнале «Russian journal of nondestructive testing».

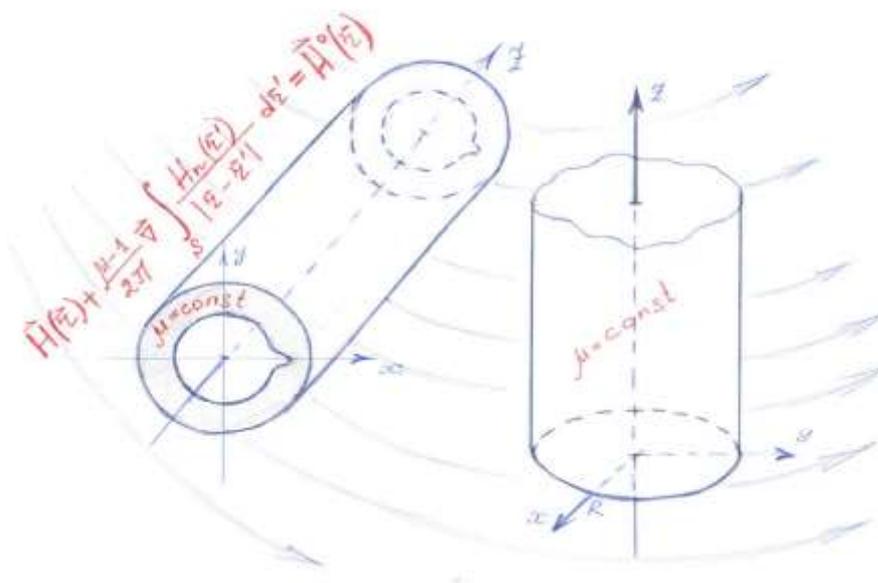


Рисунок 2.3 – К модельным постановкам задач

Результаты опубликованы в 2023 году:

[On the Solution to One Problem of Magnetostatics for a Pipe with Inner Surface Defect](#) / V.V. Dyakin<sup>1</sup>, O.V. Kudryashova<sup>1</sup>, V.Ya. Rayevskii<sup>1</sup>. – Текст: непосредственный // Russian journal of nondestructive testing. — 2023. — V. 59. — P. 204—214.

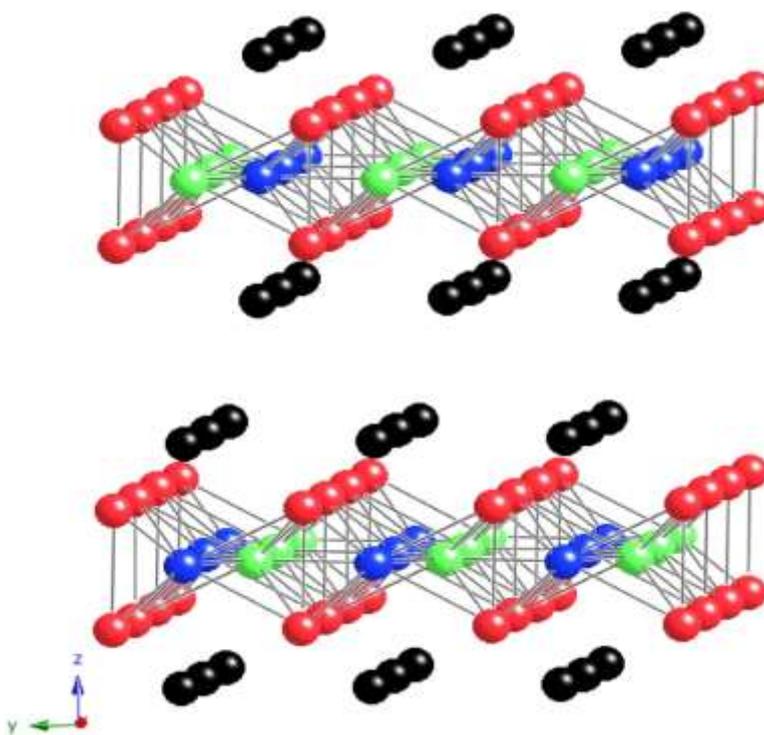
[Calculation of Magnetic Field Strength from a Semi-Infinite Cylinder Placed in an Arbitrary External Field](#) / V.V. Dyakin<sup>1</sup>, O.V. Kudryashova<sup>1</sup>, V.Ya. Rayevskii<sup>1</sup>. – Текст: непосредственный // Russian journal of nondestructive testing. — 2023. — V. 59. — P. 547—559.

2.4 В рамках модели sine–Gordon исследовано поведение на больших временах диспергирующих активационных и бесщелевых волн в полосовой доменной структуре магнетиков, а также их неадиабатическое взаимодействие с солитонами. Солитоны в доменной структуре делятся на два типа: дополнительные доменные стенки – кинки и антикинки с двумя возможными направлениями разворота намагниченности, и связанные состояния кинка и антикинка, обладающие собственной частотой пульсаций – бризеры. Показано, что наличие диспергирующих волн приводит к колебаниям ядер солитонов, затухающих со временем по степенному закону. Проанализированы индуцированные волновым полем изменения скоростей и частот солитонов. Изучены макроскопические дилатации доменной структуры из-за образования в ней солитонов, определены характерные сдвиги фазы у волновых цугов после их прохождения через кинки и бризеры.

Результаты опубликованы в 2023 году:

Kiselev, V.V. [Nonlinear interference of solitons and waves in the magnetic domain structure](#) / V.V. Kiselev, S.V. Batalov. – Текст: непосредственный // Theoretical and Mathematical Physics. — 2023. — V. 214. — P. 369—405.

2.5 Исследован фазовый переход из парамагнитной в ферромагнитную фазу в вандер-ваальсовом объемном соединении  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ . Использован ренормгрупповой подход, действие для которого построено с использованием теоретико- группового анализа определения неприводимого представления пространственной группы, ответственного за этот переход, в случае локализованных на железе магнитных моментов. Показано, что такое представление, допускающее ориентацию магнитных моментов вдоль оси с кристалла, существует. Влияние вакансий в одной из позиций железа на этот переход рассмотрено с помощью метода реплик, по аналогии с описанием замороженных примесей. Найден степенной закон изменения намагниченности вблизи перехода с учетом наличия вакансий. Определено условие, когда вакансии дают этот переход. Возможное влияние сильных электронных корреляций и свободных электронов на устойчивость ферромагнитной фазы проанализировано с помощью t-J модели для невырожденных электронов. В обобщенном приближении случайных фаз дополнительный вклад свободных электронов в формирование дальнего ферромагнитного порядка осуществляется через паулиевскую восприимчивость газа свободных электронов. Выписано условие устойчивости ферромагнитного состояния в этом случае. Материалы приняты к печати в журнале «Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики».

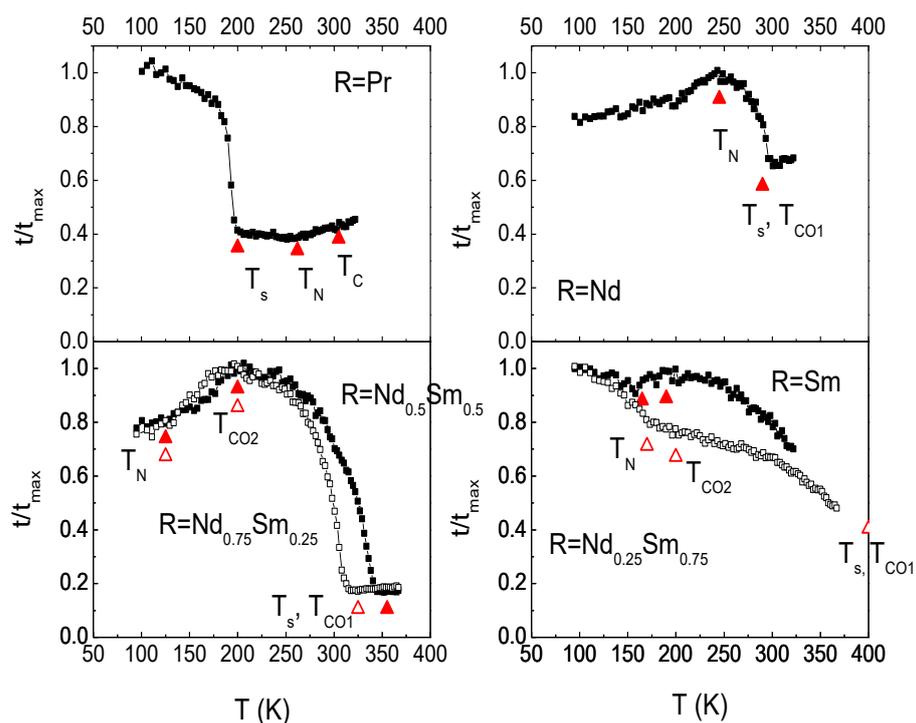


Красные –FeI, зеленые- Ge, синие FeII, черные Te.

Рисунок 4 – Кристаллическая структура соединения  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$

Наиболее важные результаты по теме «СПИНОВЫЕ ТРАНСПОРТНЫЕ, ЭЛЕКТРОННЫЕ КИНЕТИЧЕСКИЕ, МАГНИТНЫЕ ДИНАМИЧЕСКИЕ, ОПТИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА, АТОМНАЯ, ЭЛЕКТРОННАЯ И МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ, ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИХ, ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ, МЕТАЛЛОКСИДНЫХ И НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ, МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНЕТИКОВ, ТОНКИХ ПЛЕНОК И НАНОСТРУКТУР НА ИХ ОСНОВЕ»

3.1 Исследованы особенности зарядовой подсистемы двойных манганитов  $R\text{BaMn}_2\text{O}_6$  с упорядочением редкоземельных ионов  $R$  и ионов Ba в A-позиции и установлена связь со структурными фазовыми переходами и переходами в магнитной и орбитальной подсистемах. Из сопоставления оптических свойств в ближнем ИК диапазоне и структурных и магнитных свойств манганитов с  $R = \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}$ , или  $\text{Nd}_{1-x}\text{Sm}_x$  показано разное поведение зарядовой подсистемы в зависимости от типа зарядового/орбитального упорядочения и характера антиферромагнитного упорядочения (A-типа с ферромагнитным вкладом или CE типа). Обнаружено, что ниже температуры структурного фазового перехода с орбитальным упорядочением происходит усиление локализации носителей заряда; «металлическое» поведение носителей заряда появляется ниже температуры Кюри ферромагнитной фазы (для  $R=\text{Pr}$ ), ниже температуры Нееля ( $R=\text{Nd}$ ), ниже температуры смены типа орбитального упорядочения ( $R=\text{Nd}_{0.75}\text{Sm}_{0.25}, \text{Nd}_{0.5}\text{Sm}_{0.5}$ ) или отсутствует ( $R=\text{Nd}_{0.25}\text{Sm}_{0.75}, \text{Sm}$ ).



Измерения проведены при  $E=0.15$  эВ. Треугольниками отмечены температуры структурных, орбитальных и магнитных фазовых переходов. Рисунок 3.1 – Температурные зависимости относительного изменения пропускания света упорядоченных двойных манганитов  $R\text{BaMn}_2\text{O}_6$

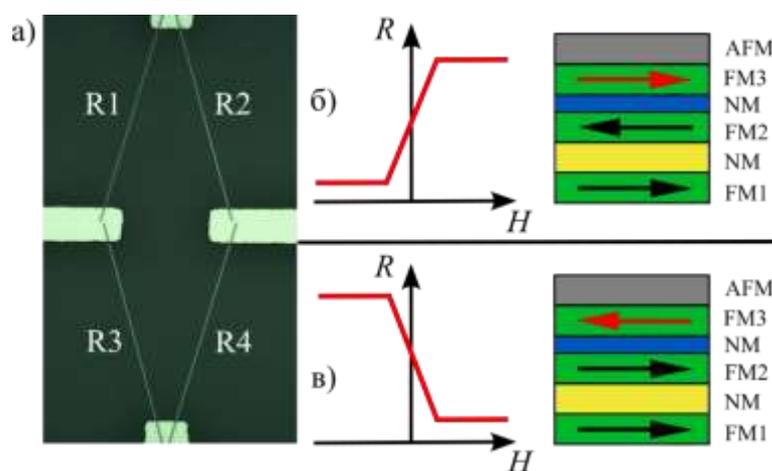
Результаты опубликованы в 2023 году:

[A-site isovalent substitution effect in the double manganites  \$\text{Nd}\_{1-x}\text{Sm}\_x\text{BaMn}\_2\text{O}\_6\$  / E.V. Sterkhov, S.A. Uporov, L.B. Vedmid, O.M. Fedorova, E.V. Mostovshchikova, S.G. Titova. – Текст: непосредственный // Materials Today Communications. — 2023. — V. 34. — P. 105005—105011.](#)

3.2 Исследовано влияние анизотропии формы и одноосной магнитной анизотропии на поворот магнитных моментов слоев при перемагничивании наноструктур типа «спиновый клапан», обладающих эффектом гигантского магнитосопротивления. Разработаны варианты дизайна систем микрообъектов для литографического изготовления сенсоров магнитного поля на основе схемы моста Уитстона. Найдены режимы единой термомагнитной обработки, позволяющие управляемым образом формировать обменный сдвиг в отдельном микрообъекте. Однонаправленная магнитная анизотропия в каждом микрообъекте определяется анизотропией формы микрообъекта и отклонением оси легкого намагничивания от приложенного при термомагнитной обработке внешнего поля. Предложенные методики позволяют реализовать высокие значения чувствительности микросенсоров магнитного поля и сократить количество технологических этапов при изготовлении магнитных датчиков. Изготовлены прототипы сенсоров магнитного поля на основе полного моста, в котором все элементы вносят активный вклад в выходной сигнал.

Результаты опубликованы в 2023 году:

[Formation of exchange bias and shape anisotropy in microobjects based on spin valves / A.A. Germizina, L.I. Naumova, M.A. Milyaev, R.S. Zavornitsyn, A.Yu. Pavlova, I.K. Maksimova, V.V. Proglyado, I.Yu. Kamensky, V.V. Ustinov. – Текст: непосредственный // Physics of the Solid State. — 2023. — V. 65. — P. 1293—1299.](#)



Стрелками показано направление магнитных моментов ферромагнитных слоев. Ось однонаправленной анизотропии, характеризующая обменный сдвиг, сонаправлена магнитному моменту слоя FM3 (красная стрелка).

Рисунок 3.2 – Микрофотография моста Уитстона (а), схематичное изображение спинового клапана и зависимостей  $R(H)$  для полученных после термомагнитной обработки сенсорных элементов R1, R4 (б) и R2, R3 (в)

3.3 Получены новые экспериментальные данные об электро- и магнитосопротивлении, а также эффекте Холла монокристаллов топологического полуметалла  $WTe_2$  в диапазоне температур от 2 до 100 К и магнитных полях до 9 Тл (рисунок 3.4). Обнаружена квадратичная температурная зависимость электросопротивления при температурах ниже 15 К. Показано, что наблюдаемые аномалии гальваномагнитных свойств, а именно - минимум на температурной зависимости сопротивления в магнитном поле и нелинейная полевая зависимость сопротивления Холла связаны с особенностями топологии поверхности Ферми  $WTe_2$  и состоянием его электронно-дырочной компенсации.

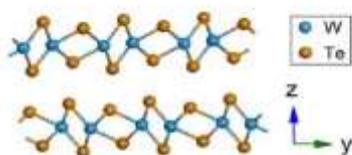


Рисунок 3.3 – Кристаллическая структура  $WTe_2$

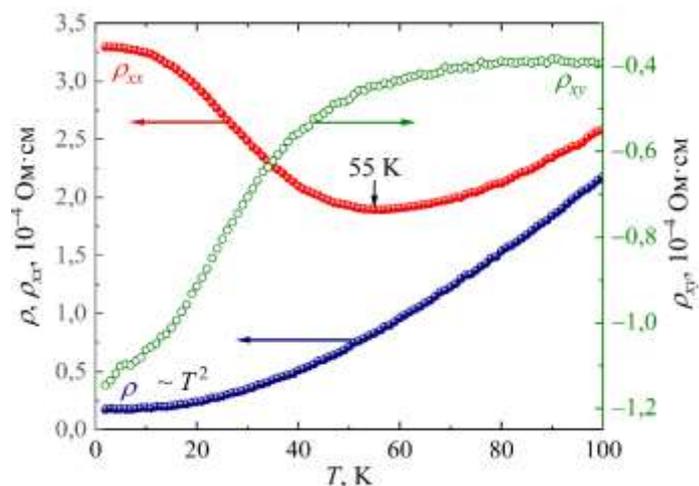


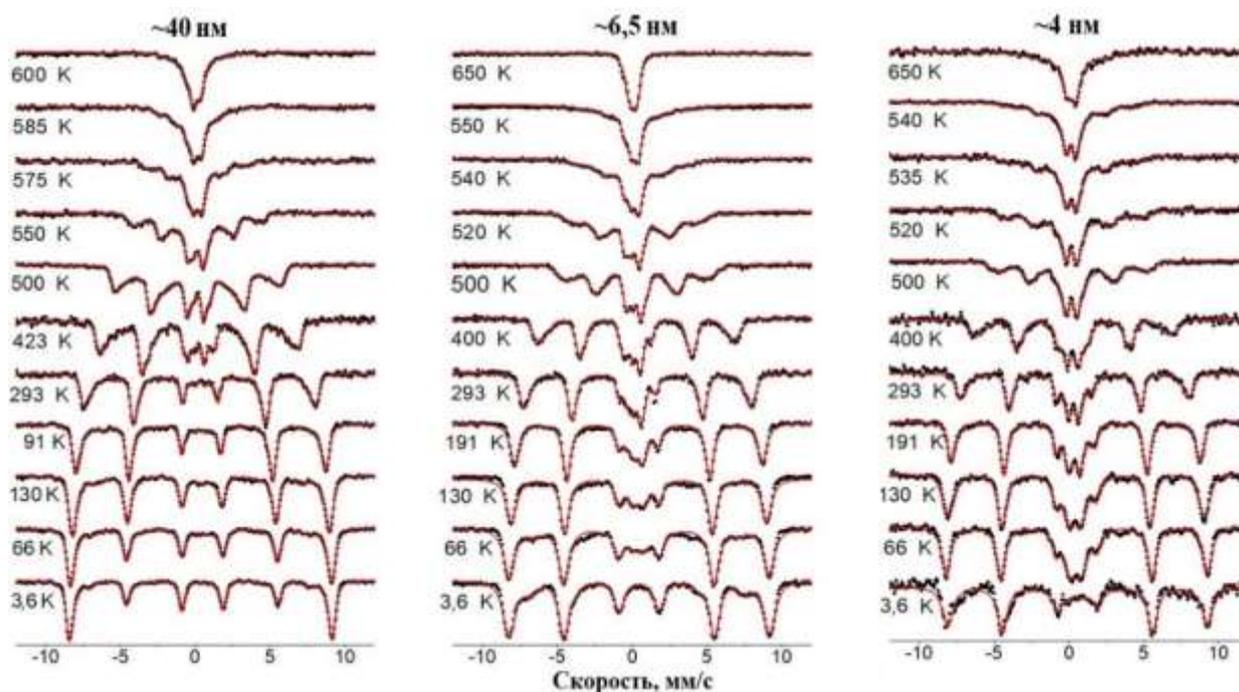
Рисунок 3.4 – Температурные зависимости электросопротивления  $\rho$  ( $B = 0$ ), магнитосопротивления  $\rho_{xx}$  и холловского сопротивления  $\rho_{xy}$  монокристалла  $WTe_2$  в магнитном поле  $B = 9$  Тл

Результаты опубликованы в 2023 году:

[Magnetoresistivity and Hall effect in Weyl semimetal  \$WTe\_2\$](#)  / A.N. Perevalova, B. M. Fominykh, V.V. Chistyakov, S.V. Naumov, V.N. Neverov, V.V. Marchenkov. – Текст: непосредственный // St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. — 2023. — V. 16. — P. 26—32.

## Наиболее важные результаты по теме «СОВРЕМЕННЫЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ»

4.1. Экспериментально исследованы структурные и магнитные свойства ультратонких монокристаллических пленок орторомбического ортоферрита  $\text{YFeO}_3$  с преимущественной ориентацией (001). Магнитные свойства исследовали методом мёссбауэровской спектроскопии с синхротронным возбуждением на синхротроне ESRF в геометрии на отражение. Показано, что при изменении температуры от 3,6 К до 650 К магнитный секстет в спектрах последовательно сужается и, одновременно, в них появляется парамагнитный дублет, свидетельствующий о развитии магнитного фазового перехода. По температурным зависимостям магнитного сверхтонкого поля определены значения температуры Нееля для основной орторомбической фазы  $\text{Y}^{57}\text{FeO}_3$  и величины критического параметра  $\beta$ . Обнаруженные особенности структурных и магнитных свойств сверхтонких пленок  $\text{YFeO}_3$  важны для их потенциального применения в наноструктурах антиферромагнитной спинтроники.



Измерения проведены для толщин пленок 40, 6,5 и 4 нм  
в интервале температур от 3,6 К до 650 К при угле скольжения 2,09 мрад

Рисунок 4.1 – Мёссбауэровские спектры пленок  $\text{YFeO}_3$

Результаты опубликованы в 2023 году:

[Magnetic Phase Transitions in Ultrathin  \$\text{YFeO}\_3\$  Films According to Synchrotron Mössbauer Reflectometry Data](#) / V.V. Izyurov, A.P. Nosov, I.V. Gribov, M.A. Andreeva. – Текст: непосредственный // *Physics of Metals and Metallography*. – 2023. – V. 124. – P. 643–652.

4.2 Исследована роль сдвиговых волн в электрон-фононной релаксации и электросопротивлении благородных металлов в рамках теории Блоха-Грюнайзена. Учет влияния упругой анизотропии на спектр и векторы поляризации фононов, а также релаксации электронов на сдвиговых компонентах квазиперечных мод, позволил количественно согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления благородных металлов с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К. (рисунок 4.2). Показано, что при низких температурах  $T \ll \theta_D^\lambda$  квазиперечные фононы вносят доминирующий вклад в электросопротивление благородных металлов. Тогда как вклад продольных фононов, который считался основным механизмом электрон-фононной релаксации в металлах, оказался менее 3%. Материалы вошли в монографию «Кулеев, И.Г Роль квазиперечных фононов и упругой анизотропии в термоэлектрических эффектах и электросопротивлении щелочных и благородных металлах / И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев // «Издательство УМЦ УПИ», Екатеринбург- 2023 - 205 с.».

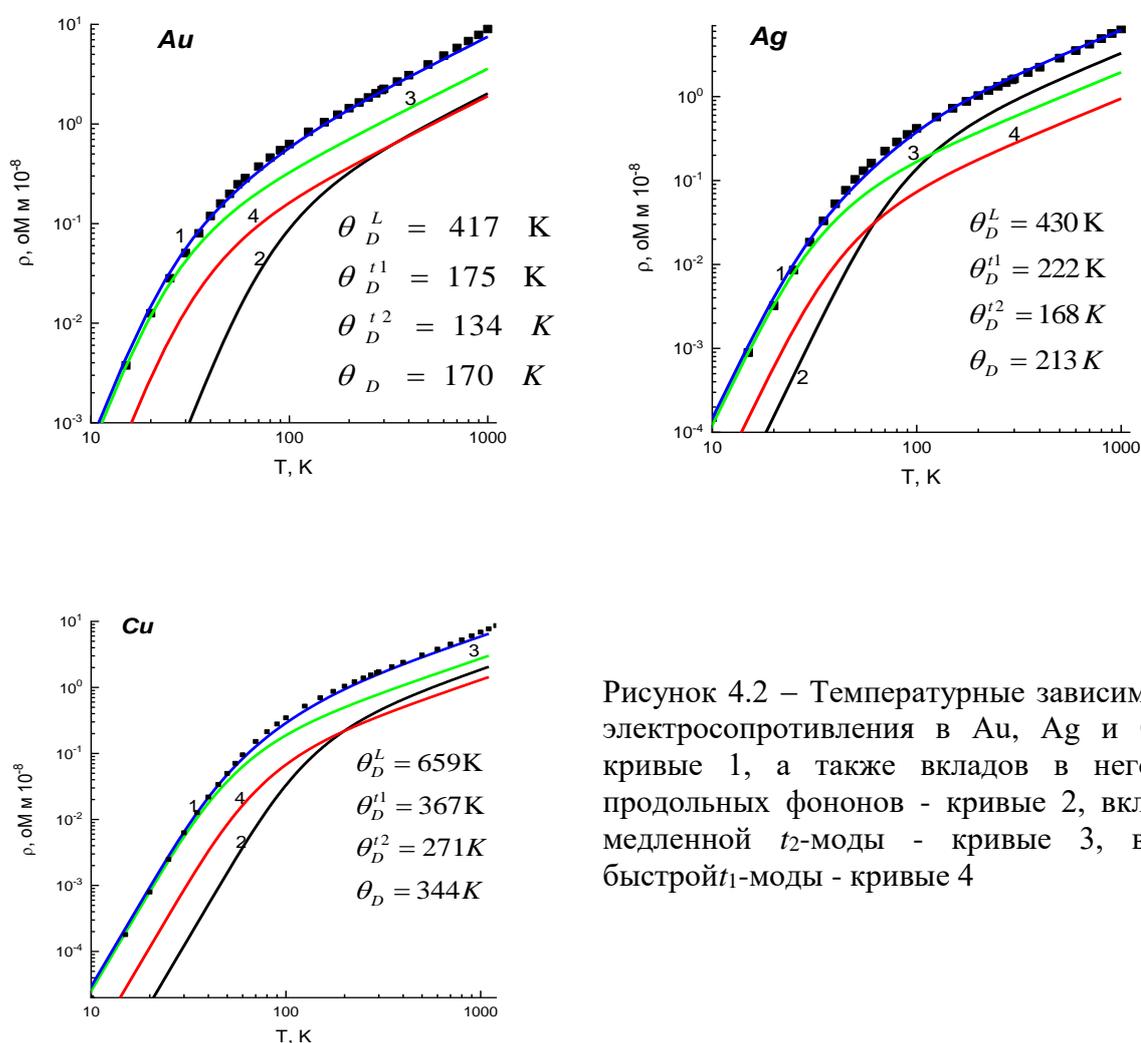
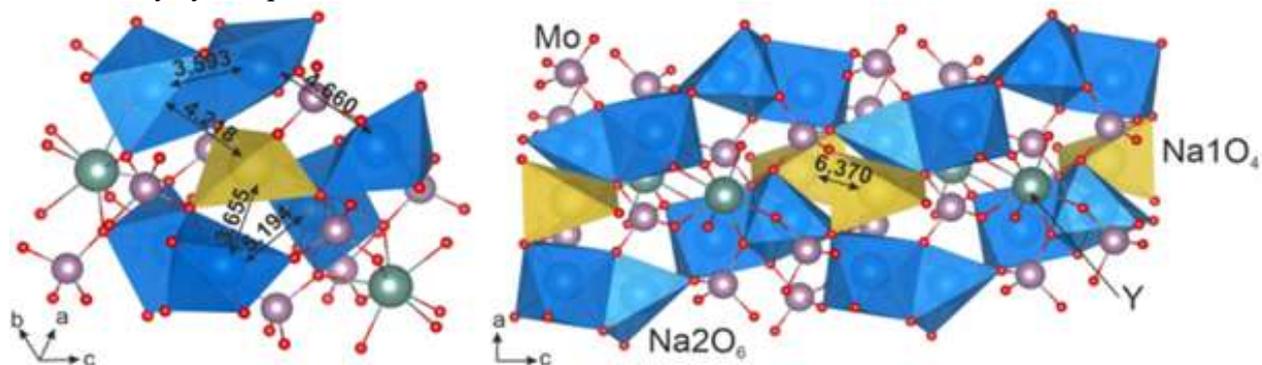


Рисунок 4.2 – Температурные зависимости электросопротивления в Au, Ag и Cu - кривые 1, а также вкладов в него от продольных фононов - кривые 2, вкладов медленной  $t_2$ -моды - кривые 3, вклад быстрой  $t_1$ -моды - кривые 4

Результаты опубликованы в 2023 году:

Kuleyev, I.G. The role of shear waves in electron-phonon relaxation and electrical resistivity of noble metals / I.G. Kuleyev, I.I. Kuleyev. – Текст: непосредственный // Chinese Journal of Physics. — 2023. — V. 83. — P. 103—112.

4.3 Впервые проведены исследования транспортных свойств и механизмов диффузии натрия в шеелитоподобных молибдатах  $\text{Na}_{5-x}\text{M}_{1-x}\text{Zr}_x(\text{MoO}_4)_4$  ( $M = \text{Y}, \text{La}, \text{Bi}$ ;  $0 \leq x \leq 0,1$ ) методами ядерного магнитного резонанса, импедансной спектроскопии и расчетов из первых принципов. Комбинация взаимодополняющих методов позволила выявить механизмы ионного транспорта на атомарном уровне. Установлено, что подвижность ионов  $\text{Na}^+$  возрастает в ряду  $\text{Y} \rightarrow \text{La} \rightarrow \text{Bi}$  и с увеличением  $x$ . Показано, что диффузия натрия обусловлена перескоками атомов между эквивалентными позициями Na2 и посредством «двухпозиционного обмена»  $\text{Na2} \leftrightarrow \text{Na1} \leftrightarrow \text{Na2}$ , в то время как перескоки  $\text{Na1} \leftrightarrow \text{Na1}$  маловероятны. Энергетический барьер для обоих типов ионных скачков равен примерно 1 эВ. Полученные в работе данные важны для создания новых материалов с заданными электрохимическими и транспортными свойствами, в том числе для натрий-ионных аккумуляторов.



На рисунке показаны межатомные расстояния.

Рисунок 4.3 – Фрагмент кристаллической структуры  $\text{Na}_5\text{Y}(\text{MoO}_4)_4$

Результаты опубликованы в 2023 году:

Mechanism of sodium diffusion in  $\text{Na}_{5-x}\text{M}_{1-x}\text{Zr}_x(\text{MoO}_4)_4$  ( $M = \text{Y}, \text{La}, \text{Bi}$ ;  $0 \leq x \leq 0.1$ ) revealed from  $^{23}\text{Na}$  NMR, impedance spectroscopy and ab initio calculations / D.S. Fedorov, A.L. Buzlukov, Y.V. Baklanova, T.A. Denisova, D.V. Suetin, N.I. Medvedeva, L.G. Maksimova, D.V. Korona, T.S. Spiridonova, A.P. Tyutyunnik, I. Yu Arapova, S.F. Solodovnikov. – Текст: непосредственный // *Ceramics International*. — 2023. — V. 49. — P. 40551—40559.

Наиболее важные результаты по теме «ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ  
СОЗДАНИЯ НОВЫХ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ  
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ И СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ  
В РАЗЛИЧНЫХ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЯХ»

5.1 Методами рентгеновской дифракции, дифференциальной сканирующей калориметрии, мёсбауэрской спектроскопии и магнитометрии исследовано мартенситное превращение в сплавах системы Fe–Ni с содержанием Ni от 3 до 20 ат.%. Определены фазовые границы прямого  $\gamma \rightarrow \alpha$  и обратного  $\alpha \rightarrow \gamma$  превращений. На рисунке 5.1 представлены результаты рентгеновской дифракции, сканирующей калориметрии и магнитной восприимчивости в сравнении с ранними дилатометрическими измерениями (Jones et al., J. Iron Steel Inst. 163 (1949) 121). Показано, что метастабильная диаграмма, включающая гистерезис мартенситного превращения, может быть использована совместно с равновесной диаграммой для определения структурного состояния системы. На основе анализа мёсбауэровских спектров установлено, что структура закаленных сплавов представляет собой систему ОЦК областей переменного состава, которая формируется в результате концентрационного расслоения [1]. На рисунке 5.2 приведены данные для разных значений сверхтонкого поля, для сплавов Fe–Ni при комнатной температуре.

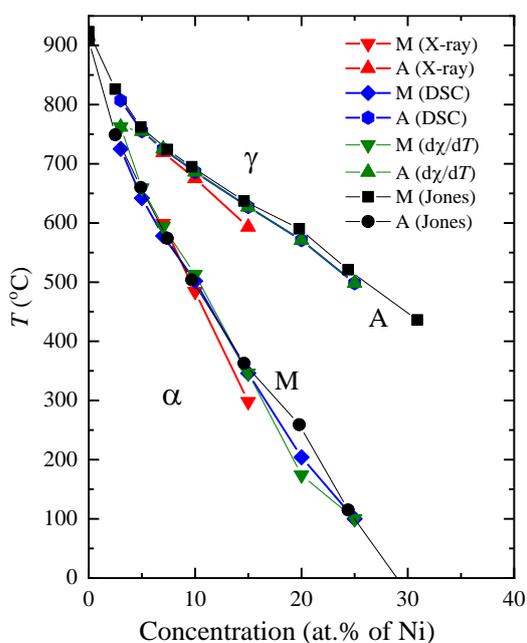


Рисунок 5.1 – Фазовая диаграмма сплавов Fe-Ni

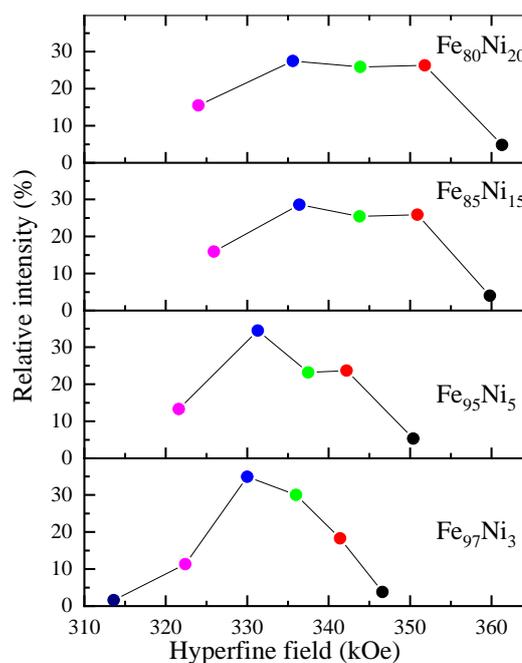


Рисунок 5.2 – Относительные площади мёсбауэровских подспектров для сплавов Fe-Ni

Результаты опубликованы в 2023 году:

Structural transformations of low-nickel Fe-Ni alloys probed by Mössbauer spectroscopy / N.M. Kleinerman, N.V. Mushnikov, A.V. Protasov, V.S. Gaviko, O.A. Golovnya, S.P. Naumov. – Текст: непосредственный // Journal of Alloys and Compounds. — 2023. — V. 962. — P. 171132—171139.

5.2 Синтезированы поликристаллические образцы слоистых соединений  $\text{Fe}_{0.25}\text{TaS}_{2-y}\text{Se}_y$ , интеркалированные атомами железа. Образцы исследованы с помощью рентгеновской дифракции, измерений намагниченности, электросопротивления и магнитосопротивления. Установлено, что все соединения  $\text{Fe}_{0.25}\text{TaS}_{2-y}\text{Se}_y$  проявляют ферромагнитное поведение и обладают гигантской коэрцитивной силой ( $H_c$ ) порядка (40 – 60) кЭ при низких температурах. Почти двукратное уменьшение температуры Кюри (от 120 К при  $y = 0$  до 60 К при  $y = 2$ ) при замещении связывается с уменьшением поляризации 5d-электронов тантала, посредством которого происходит не прямое обменное взаимодействие между 3d-электронами Fe. Обнаружено, что изменение низкотемпературной (при  $T = 2$  К) коэрцитивной силы при замещении серы селеном коррелирует с концентрационной зависимостью температуры Кюри, что свидетельствует об изинговском спиновом состоянии ионов Fe во всем концентрационном интервале ( $0 \leq y \leq 2$ ). Материалы опубликованы в журнале «Materials Chemistry and Physics».

Результаты опубликованы в 2023 году:

Magnetism and EPR Spectroscopy of Nanocrystalline and Amorphous  $\text{TiO}_2$ : Fe upon Al Doping / A. Yermakov, M. Uimin, K. Borodin, A. Minin, D. Boukhvalov, D. Starichenko, A. Volegov, R. Eremina, I. Yatsyk, G. Zakharova, V. Gaviko. – Текст: непосредственный// Magnetochemistry. — 2023. — V. 9. — P. 1—16.

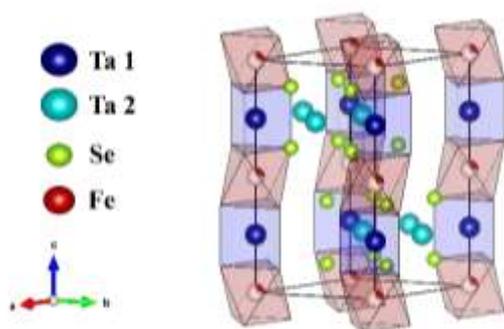


Рисунок 5.3 – Схема кристаллической структуры соединений  $\text{Fe}_{0.25}\text{TaS}_{2-y}\text{Se}_y$

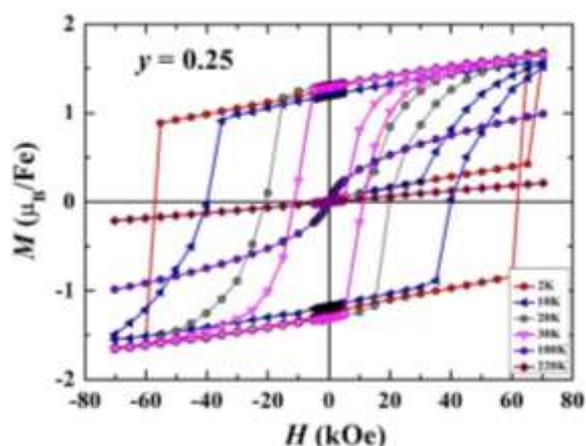


Рисунок 5.4 – Полевые зависимости намагниченности в расчете на ион Fe, измеренные при разных температурах на образце с содержанием селена  $y = 0.25$

5.3 Ранее нами экспериментально и теоретически было установлено, что ионы железа уже при относительно небольших концентрациях в матрице  $\text{TiO}_2$  образуют димеры или даже кластеры с отрицательным обменным взаимодействием. Основным результатом работы состоит в том, что как при двойном (Fe, Al) объемном допировании  $\text{TiO}_2$ , так и при размещении атомов железа на поверхности  $\text{TiO}_2$  они не распределяются случайным образом, а формируют димеры или кластеры с отрицательными обменными взаимодействиями между ионами железа [2, 3].

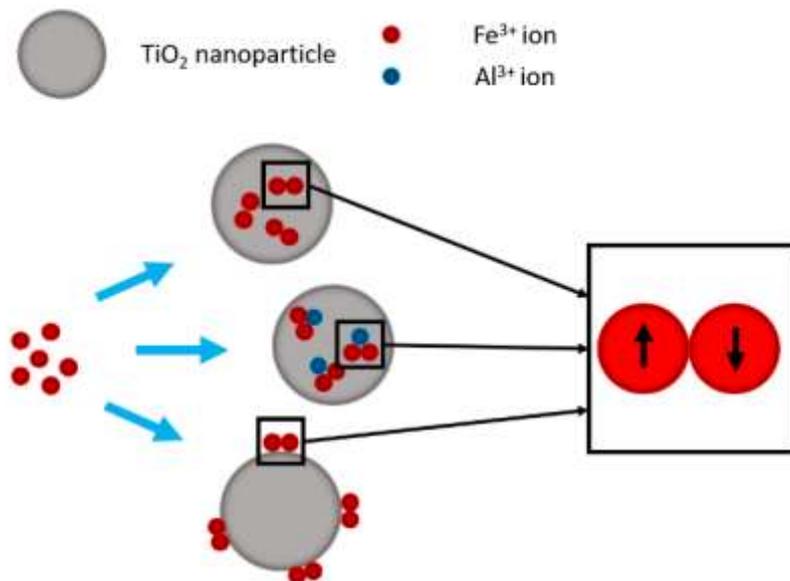


Рисунок 5.5 – Распределение ионов Fe в объеме  $\text{TiO}_2$ : (Fe, Al) и на поверхности наночастиц  $\text{TiO}_2$ , формирующих димеры с отрицательными обменными взаимодействиями

Результаты опубликованы в 2023 году:

Magnetism and Electronic State of Iron Ions on the Surface and in the Core of  $\text{TiO}_2$  Nanoparticles / A.Ye. Yermakov, M.A. Uimin, D.W. Boukhvalov, A.S. Minin, N.M. Kleinerman, S.P. Naumov, A.S. Volegov, D.V. Starichenko, K.I. Borodin, V.S. Gaviko, S.F. Konev, N.A. Cherepanov. – Текст: непосредственный // Magnetochemistry. — 2023. — V. 9. — P. 198—214.

Наиболее важные результаты по теме «РАЗРАБОТКА НОВЫХ ЭФФЕКТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПОЛУЧЕНИЯ И ОБРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ С ВЫСОКИМИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ И КОНСТРУКЦИОННЫМИ СВОЙСТВАМИ НА ОСНОВЕ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ»

6.1 Исследован механизм самоорганизации структуры азотистых сталей в виде циклических структурно-фазовых переходов, индуцированных большой пластической деформацией и включающих в себя релаксацию по пути механического легирования азотом металлической матрицы и распада неравновесных твердых растворов с образованием упрочненной вторичными наноразмерными нитридами структуры композиционных сталей. В объеме (при сдвиге в наковальнях Бриджмена) на поверхности (при сухом трении скольжения) высокоазотистой аустенитной стали  $\text{FeMn}_{22}\text{Cr}_{18}\text{N}_{0.83}$ , а также в смесях порошков (при помоле в мельнице) в сплавах железа с нитридами установлено ускорение процессов динамического старения при увеличении температуры и степени деформации (рисунок 6.1), а также химического сродства элементов легирования с азотом. В исследовании влияния контактных напряжений на структуру поверхностных слоев и продуктов адгезионного изнашивания установлено формирование градиентной по концентрации и фазовому составу структуры, обусловленной наличием областей сжатия и растяжения, а также градиента температуры в зоне фрикционного контакта. Сделано заключение, что выбор условий деформации, а также учет степени химического сродства 3d элементов с азотом позволяет регулировать структуру и свойства азотсодержащих композиционных сталей.

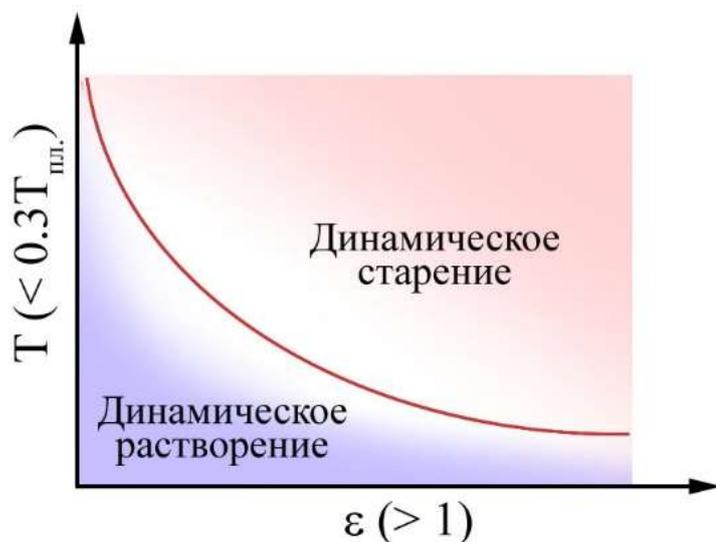
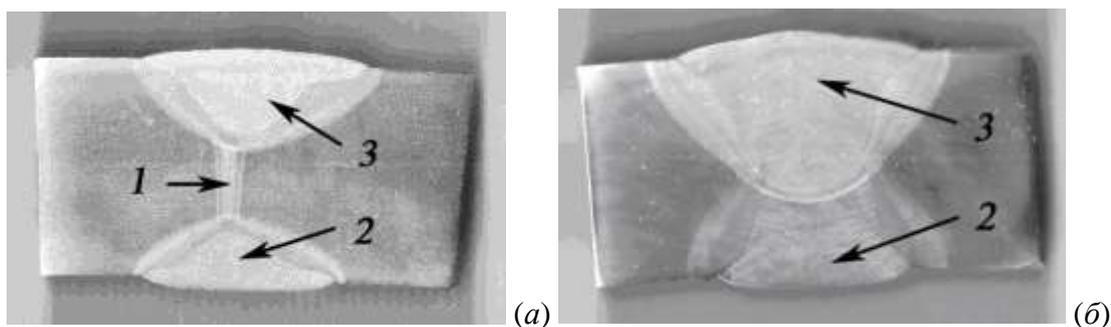


Рисунок 6.1 – Граница инверсии направления атомного массопереноса в индуцированных большой пластической деформацией фазовых переходах

Результаты опубликованы в 2023 году:

Structure–phase transitions in the friction contact zone of high-nitrogen chromium–manganese austenitic steel / V.A. Shabashov, L.G. Korshunov, K.A. Kozlov, K.A. Lyashkov, A.E. Zamatovskii, G.A. Dorofeev, N.V. Kataeva. – Текст: непосредственный // Metals. — 2023. — V. 13. — P. 1433—1444.

6.2 Показано, что для промышленной сварки труб большого диаметра из низкоуглеродистых низколегированных сталей перспективно применять инновационную технологию, совмещающую процессы гибридной лазерно-дуговой сварки (ГЛДС) и дуговой сварки под слоем флюса (ДСФ). Комбинация этих методов с выполнением корневого шва ГЛДС позволяет устранить зоны локальной хрупкости, возникающие при использовании традиционной технологии двусторонней ДСФ, и получить сварное соединение, обладающее повышенным уровнем ударной вязкости (рис. 6.2). Преимущество инновационной технологии обусловлены формированием в области шва ГЛДС дисперсной структуры речного бейнита и вязким характером разрушения металла.



- 1 – шов ГЛДС;
- 2 – внутренний облицовочный шов ДСФ;
- 3 – наружный облицовочный шов ДСФ;
- а) инновационная технология;
- б) традиционная технология

Рисунок 6.2 – Макроструктура сварных соединений, выполненных с применением различных технологий

Результаты опубликованы в 2023 году:

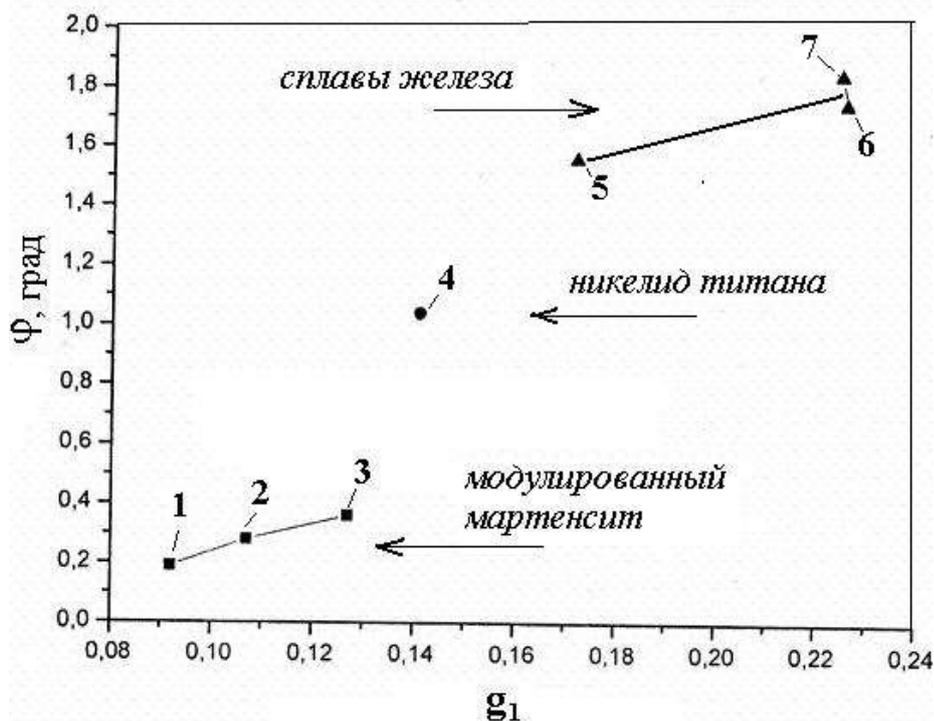
Raising the impact toughness of welded joints of large-diameter pipes formed with the use of hybrid laser-arc welding / N.A. Tereshchenko, I.L. Yakovleva, M.A. Fedorov, A.B. Gizatullin, T. S. Esiev. – Текст: непосредственный // Metal Science and Heat Treatment. — 2023. — V. 64. — P. 589—595.

6.3 В предложенной нами ранее кристаллографической теории мартенситного превращения (КТМП) появляется новая характеристика мартенситного превращения – релаксационный поворот мартенситного кристалла. Поворот необходим для получения инвариантной плоскости. Рассчитанная величина угла поворота составляет от 0.19 до 0.36 градусов (в термоупругих сплавах Гейслера с модулированной структурой мартенсита) до (1.75-1.85) градусов (в нетермоупругих сплавах железа). Установлена зависимость угла поворота от типа кристаллических решёток аустенита и мартенсита. Измерена величина рассеяния текстуры мартенситных пиков в трёх исследованных сплавах (рисунок 6.3). Установлено, что углы рассеяния текстуры совпадают с рассчитанными углами поворота с точностью до  $\pm 10\%$ . Этот результат подтверждает реальность механизма мартенситного превращения, предложенного в КТМП.

Результаты опубликованы в 2023 году:

Gundyrev, V.M. Relaxation Rotation during Martensitic Transformation in Alloys with Thermoelastic and Nonthermoelastic Martensite / V.M. Gundyrev, V.I. Zel'dovich. – Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography. – 2023. – V. 124. – P. 388–393.

Gundyrev, V.M. Relaxation Rotation during Martensitic Transformation and Scattering of the Martensite Texture / V.M. Gundyrev, V.I. Zel'dovich, V.M. Schastlivtsev. – Текст: непосредственный // Doklady physics. — 2023. — V. 68. — P. 36—39.



Представлены результаты для семи сплавов: Ni<sub>51</sub>Mn<sub>24</sub>Ga<sub>25</sub> (1), Ni<sub>63</sub>Al<sub>37</sub> (2), Ni<sub>47</sub>Mn<sub>42</sub>In<sub>11</sub> (3), Ti<sub>49</sub>Ni<sub>51</sub> (4), Fe-1.75C (5), Fe-31Ni (6), сталь 37ХН3А (7).

Рисунок 6.3 – Зависимость величины угла релаксационного поворота  $\phi$  от величины угла макроскопического сдвига  $g_1$

6.4 Впервые высокопрочные и пластичные объемные сплавы с эффектами памяти формы и сверхупругости на основе Ti-Ni (в интервале составов  $Ti_{50}Ni_{50}$  –  $Ti_{49}Ni_{51}$ ) получены с использованием разработанных способов термической и термомеханической обработки, сочетающих дисперсионное твердение и образование ультрамелкозернистой структуры при термической обработке за счет рекристаллизации после многопроходной пластической деформации прокаткой или волочением. Завершающий эффект упрочнения (предел прочности (1200-1600) МПа) и пластичности (20-80) % обеспечивается благодаря деформационно индуцированному мартенситному превращению при испытаниях механических свойств (или эксплуатации). Максимальные прочность и особенно пластичность достигается в высокочистом сплаве  $Ti_{49,4}Ni_{50,6}$  (с примесями O=0.017, C=0.037 мас. %). Предложен и экспериментально обоснован принцип твердорастворного многокомпонентного легирования по титановой и никелевой подрешеткам B2 (CsCl) кристаллической структуры никелида титана химическими элементами из титановой группы (Zr, Hf, Sc) и никелевой группы (Pd, Pt, Cu, Au) периодической таблицы Менделеева, обеспечивающий создание B2-сплавов с высокотемпературными термоупругими мартенситными превращениями и эффектами памяти формы и сверхупругости (рисунки 6.4, 6.5).

Результаты опубликованы в 2023 году:

The Structure and Mechanical Properties of the Aging Shape-Memory  $Ti_{49}Ni_{51}$  Alloy after Thermomechanical Treatment / N.N. Kuranova, V.V. Makarov, V.G. Pushin, N.A. Popov. – Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography. — 2023. — V. 124. — P. 230—237.

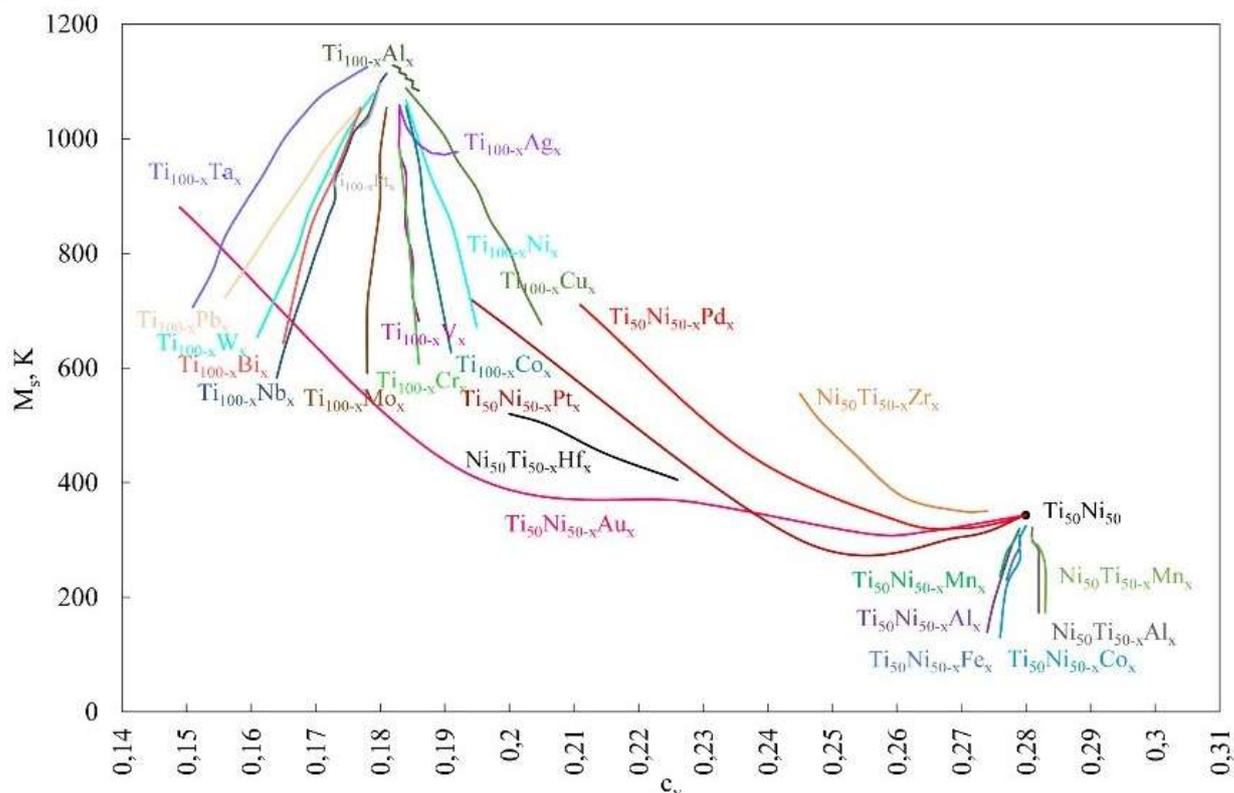


Рисунок 6.4 – Зависимость температуры начала термоупругих мартенситных превращений в сплавах на основе титана и интерметаллидах никелида титана

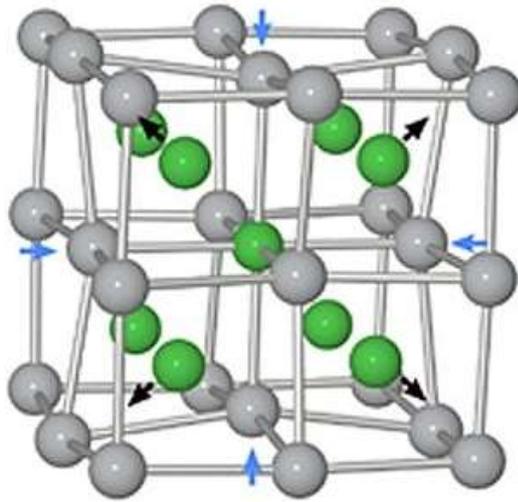


Рисунок 6.5 – Модель “anti-site” дефектов и дисторсий B2-решетки при легировании

6.5 Смесь порошков интерметаллида  $Al_2Au$  и меди обрабатывали методом размола в шаровой мельнице (ПШМ). Фазовый состав полученного порошка и микроструктуру отдельных частиц изучали методами ПЭМ, СЭМ и РФА (рисунок 6.6). Установлено, что ПШМ в течение 4 ч приводит к образованию  $Cu$ -кластеров, равномерно распределенных среди частиц  $Al_2Au$ . Обнаружено уменьшение параметра решетки фазы  $Al_2Au$ , что связано с образованием твердого раствора меди в  $Al_2Au$ . Полученный порошок был скомпактирован и затем расплавлен в атмосфере аргона с получением слитка  $Al_2Au + Cu$ . Изучение структуры сплава выявило формирование ярко окрашенных областей интерметаллической фазы  $Al_2Au$ , которые находятся в матрице из интерметаллида  $AlAu$  (рисунок 6.7). Внутри  $AlAu$ -матрицы обнаружены тонкие прожилки, обогащенные медью. Обе фазы  $Al_2Au$  и  $AlAu$  имеют высокие значения микротвердости (3,9 и 3,4 ГПа) и контактного модуля упругости (111 и 100 ГПа) соответственно. Энергетическая зависимость отражательной способности выявила, что по сравнению с бинарным интерметаллидом  $Al_2Au$ , пурпурный цвет у тройного интерметаллического соединения  $Al_2Au + 4 \text{ мас. \% } Cu$  сохраняется, но несколько ослабевает.

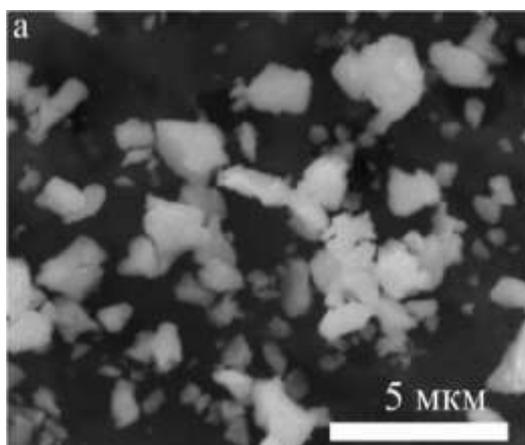
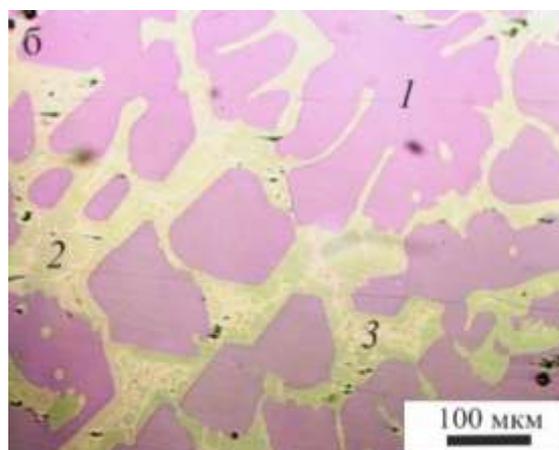


Рисунок 6.6 – СЭМ, общий вид порошка  $Al_2Au + Cu$ , полученного методом ПШМ



1 – фаза  $Al_2Au$ ; 2 – фаза  $AlAu$ ; 3 – прожилки фазы  $AlAu$ , обогащенной  $Cu$

Рисунок 6.7 – оптическая микроскопия, структура литого сплава  $Al_2Au$  с добавкой  $Cu$

Результаты опубликованы в 2023 году:

The Structure of Cast  $Al_2Au$  Intermetallic Compound with Added  $Cu$  / E.G. Volkova, B.D. Antonov, V.A. Zavalishin, Yu.V. Knyazev, A.A. Gavrilova, A.Yu. Volkov. – Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography. – 2023. – V. 124. – P. 544–550.

Наиболее важные результаты по теме «ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРЫ, ФАЗОВОГО СОСТАВА И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ, ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ, КОНСТРУКЦИОННЫХ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СПЛАВОВ И КОМПОЗИТОВ В РЕЗУЛЬТАТЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ДАВЛЕНИЯ, ДЕФОРМАЦИИ И ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ»

7.1 Разработан способ неразрушающего контроля уровня ударной вязкости изделий из среднеуглеродистых конструкционных сталей, термообработанных методом светлой изотермической закалки в интервале температур бейнитного превращения. На основании исследований структуры и механических свойств сталей после изотермической закалки впервые обнаружена четкая корреляция термической устойчивости остаточного аустенита с уровнем ударной вязкости стали. Способ заключается в магнитометрическом определении количества остаточного аустенита до и после охлаждения в жидком азоте, вычислении термической устойчивости этого остаточного аустенита для контролируемого изделия и получении значения ударной вязкости изделия при сравнении этих данных с кривыми, построенными для образцов-эталонов, подвергнутых изотермической закалке при температурах и выдержках во всем интервале бейнитного превращения. Графики построены в координатах «время изотермической выдержки» – «термическая устойчивость остаточного аустенита (уровень ударной вязкости)» для стали, используемой при производстве контролируемых изделий. Термическая устойчивость остаточного аустенита образцов, представленных на рисунке 7.1, закаленных при  $T = 375\text{ }^{\circ}\text{C}$  со временем выдержки 25 мин, составляет 100% и соответствует значению ударной вязкости  $KCU = 1,2\text{ МДж/м}^2$ .

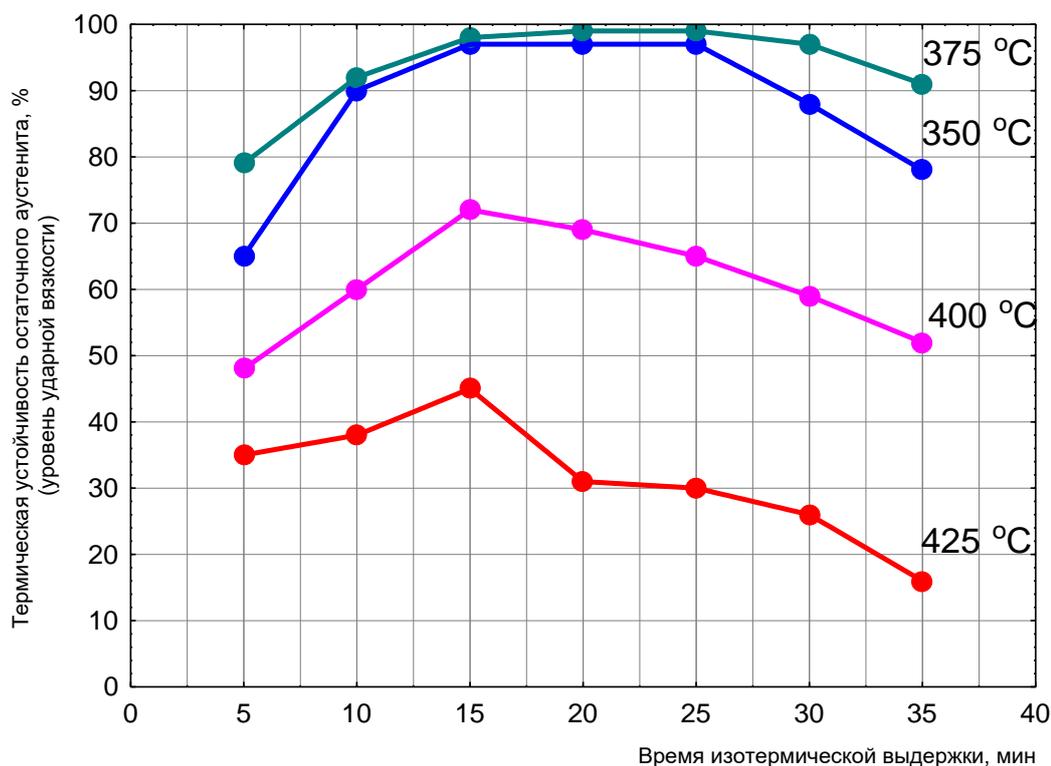


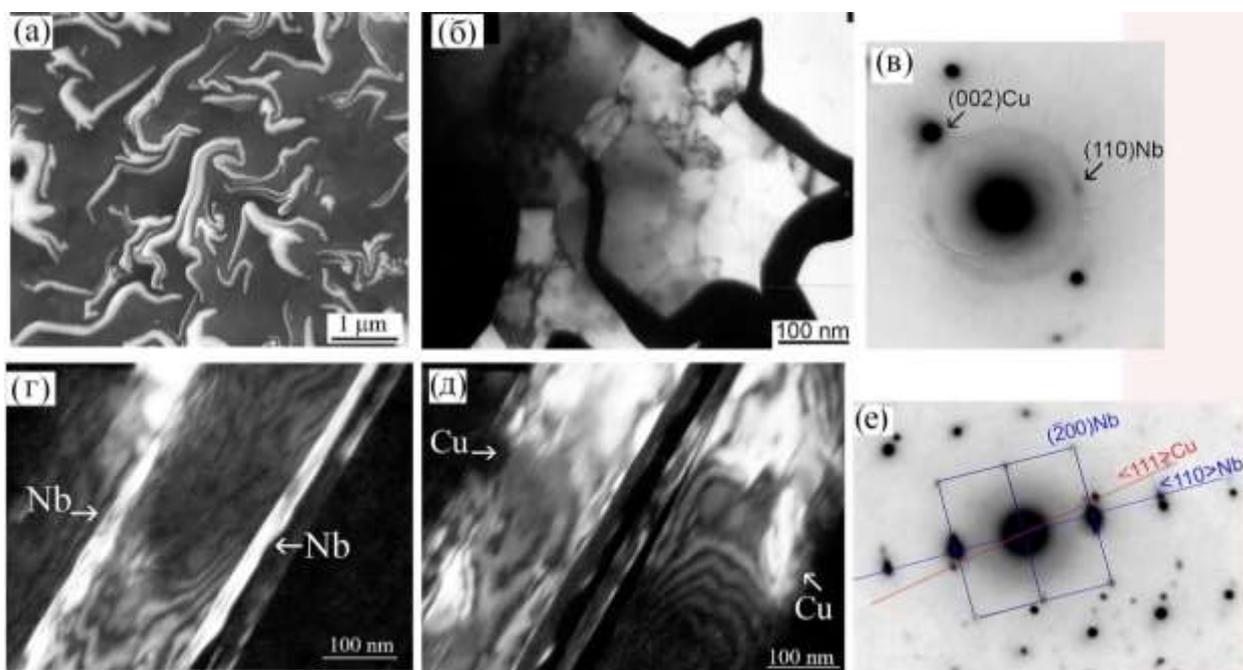
Рисунок 7.1 – Диаграмма-эталон, построенная для стали 38ХС после изотермической закалки

Результаты опубликованы в 2023 году:

Калетин, А.Ю. Остаточный аустенит в структуре бескарбидного бейнита и его влияние на ударную вязкость конструкционных сталей / А.Ю. Калетин, Ю.В. Калетина,

Ю.Н. Симонов. – Текст: непосредственный // Металловедение и термическая обработка металлов. — 2023. — V. 11. — P. 10—15.

7.2 Структура композиционного провода Cu-7.7Nb исследована на различных этапах волочения до и после отжига. РСА показал, что основным аккумулятором микронапряжений являются Nb-волокна. Снятие напряжений при отжиге восстанавливает пластичность провода, позволяя дальнейшим волочением получить провод диаметром 0.05 мм с прочностью на разрыв  $\sigma_B = 1227$  МПа. Согласно данным РСА, аксиальная текстура (110)Nb устойчива к исследованным режимам отжига. Расчет поперечных размеров Nb-волокон показал, что: повышение прочности композита при деформации сопровождается увеличением плотности Cu/Nb интерфейса и измельчением структуры Nb волокон; отжиг приводит к изменению морфологии Nb волокон, снижению плотности интерфейса и прочности композита. Так, после отжига 800 °С/1ч плотность интерфейса снижается в 1.9 раза, предел прочности - в 1.8 раза. При волочении провода после отжига полугогерентная граница на Cu/Nb интерфейсе восстанавливается, о чем свидетельствуют возникающие в ниобии макронапряжения и данные ПЭМ. Прочность провода при этом резко возрастает, превышая предел прочности, рассчитанный по правилу смесей для меди и ниобия.



СЭМ (а) и ПЭМ (б, г, д) изображения поперечных (а, б) и продольных (г, д) сечений провода Cu-7.7Nb (диаметр 2.54 мм, истинная деформация 5.4); светлопольное изображение (б) и соответствующая электронограмма (в); темнопольные изображения в рефлексах (110)Nb (г) и (111)Cu (д) и соответствующая электронограмма (е), ось зоны  $[001]_{Nb}$ .

Рисунок 7.2 – Экспериментальные данные исследований сечений провода Cu-7.7Nb

Результаты опубликованы в 2023 году:

Valova-Zaharevskaya, E.G. Evolution of the structure of Cu-7.7%Nb microcomposites under large plastic deformation / E.G. Valova-Zaharevskaya, E.N. Popova, I.L. Deryagina. – Текст: непосредственный // Letters on Materials. — 2023. — V. 13. — P. 368—372.

Deryagina, I.L. Structure and Properties of High-Strength Cu-7.7Nb Composite Wires under Various Steps of Strain and Annealing Modes / I.L. Deryagina, E.N. Popova, E.I. Patrakov. – Текст: непосредственный // Metals. — 2023. — V. 13. — P. 1576—1593.

7.3 Рассмотрена диффузия по сети тройных стыков зерен в условиях, когда диффузия по всем остальным диффузионным путям пренебрежимо мала. Для случая больших времен средствами операционного исчисления решена задача о диффузии по сети, которая состоит из вертикальных и горизонтальных ветвей. (К каждой вертикальной ветви примыкает одно и то же число горизонтальных ветвей.) При помощи сравнения невозмущенного и поправочного членов найдены условия, когда такая сеть ведет себя, как однородная среда. Для квазистационарного режима найден эффективный коэффициент диффузии сетки при произвольной ориентировке ветвей в отсутствии текстуры. Он равен одной третьей от истинного коэффициента диффузии ветви. Сопоставление решения диффузионной задачи для сети из горизонтальных и вертикальных ветвей с выражением для эффективного коэффициента диффузии позволяет сделать вывод, что адекватной моделью для диффузии по сетке тройных стыков в безтекстурном материале является сетка с кубическими ячейками. Системы.

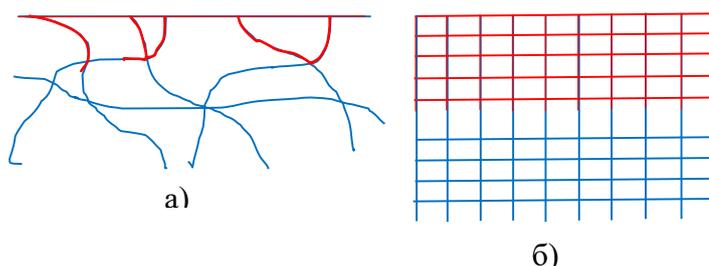


Рисунок 7.3 – Диффузия по сети тройных стыков (а) истинный вид (б) схема для расчета

Результаты опубликованы в 2023 году:

Kesarev, A.G. Diffusion along a Network of Triple Junctions / A.G. Kesarev, V.V. Kondrat'ev. – Текст: непосредственный // *Physics of Metals and Metallography*. — 2023. — V. 124. — P. 296—302.

7.4 Сплавы системы Cu–Pd и Cu–Pd–Ag, благодаря малому электросопротивлению, могут найти применение в качестве коррозионностойких проводников слабых электрических сигналов. Показано, что отжиг деформированного сплава Cu–3Pd–3Ag в температурном интервале (150-250) °С приводит к аномальному повышению прочностных свойств. Так, после криодеформации и отжига (200 °С, 1 ч) предел текучести сплава Cu–3Pd–3Ag ( $\sigma_{0,2}=720$  МПа) становится в 2 раза выше предела текучести сильно деформированной чистой меди ( $\sigma_{0,2}=350$  МПа). Криодеформация существенно повышает термическую стабильность структуры чистой меди и сплавов Cu–Pd, Cu–Pd–Ag (рисунок 7.4). Малые добавки серебра незначительно влияют на электропроводность сплавов Cu–Pd. Показано, что после длительных отжигов в сплаве Cu–5,9ат.% Pd формируются зародыши упорядоченной  $L1_2$  фазы, что противоречит фазовой диаграмме. Температура фазового перехода порядок–беспорядок ( $T_c$ ) в сплаве Cu–5,9Pd приблизительно равна 340 °С. Сплавы Cu–3Pd и Cu–3Pd–3Ag, представленные на рисунке 4, предварительно деформированы при комнатной и криогенной температурах (истинная деформация ( $\epsilon$ ) приблизительно равна 2.3).

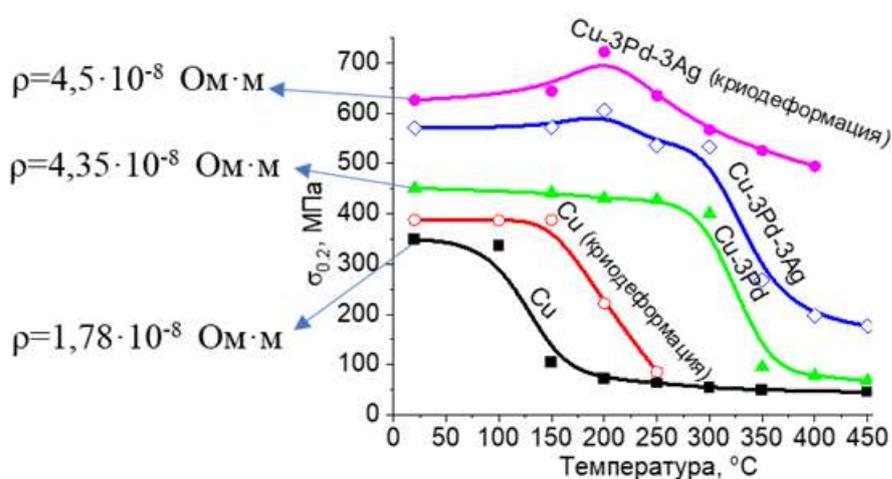


Рисунок 7.4 – Зависимость предела текучести от температуры отжига образцов Cu, сплавов Cu-3Pd и Cu-3Pd-3Ag

Результаты опубликованы в 2023 году:

The influence of deformation at cryogenic or room temperature followed by annealing on the structure and properties of copper and its Cu–3Pd and Cu–3Pd–3Ag (at. %) alloys / O.S. Novikova, A.E. Kostina, Yu.A. Salamatov, D.A. Zgibnev, A.Yu. Volkov. – Текст: непосредственный // Frontier Materials & Technologies. — 2023. — V. 2. — P. 67—74.

**Наиболее важные результаты по теме «КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ, МАГНИТНАЯ СТРУКТУРЫ И МИКРОСТРУКТУРА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ИХ ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ОСОБЕННОСТИ ВОЗДЕЙСТВИЯ НА НИХ ПОТОКОВ НЕЙТРОНОВ, ЭЛЕКТРОНОВ И ИОНОВ, ИССЛЕДУЕМЫЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НОВЕЙШИХ МЕТОДОВ РЕНТГЕНО- И НЕЙТРОННО-СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА**

Сплавы с магнитным фазовым переходом I рода и сильным магнитоупругим взаимодействием представляют значительный интерес для использования в криогенной технике. С использованием обменно - стрикционной модели Бина-Ротбелла-Киттеля для ферромагнетиков с магнитным фазовым переходом I рода и сильным магнитоупругим взаимодействием получены аналитические выражения для магнитной восприимчивости, теплоемкости, сжимаемости, которые аномально возрастают в окрестности критической точки, и проведен расчет магнитной фазовой диаграммы в магнитном поле. Показано, что кривая перехода оканчивается в критической точке ( $H_c$ ,  $T_c$ ), подобной критической точке жидкость - газ на плоскости ( $T$ ,  $P$ ). Выявлено хорошее совпадение результатов развитой теории с имеющимися литературными экспериментальными данными по системе  $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$ . Результаты расчета для этого материала в ферромагнитном состоянии показаны на рисунке 8.1.

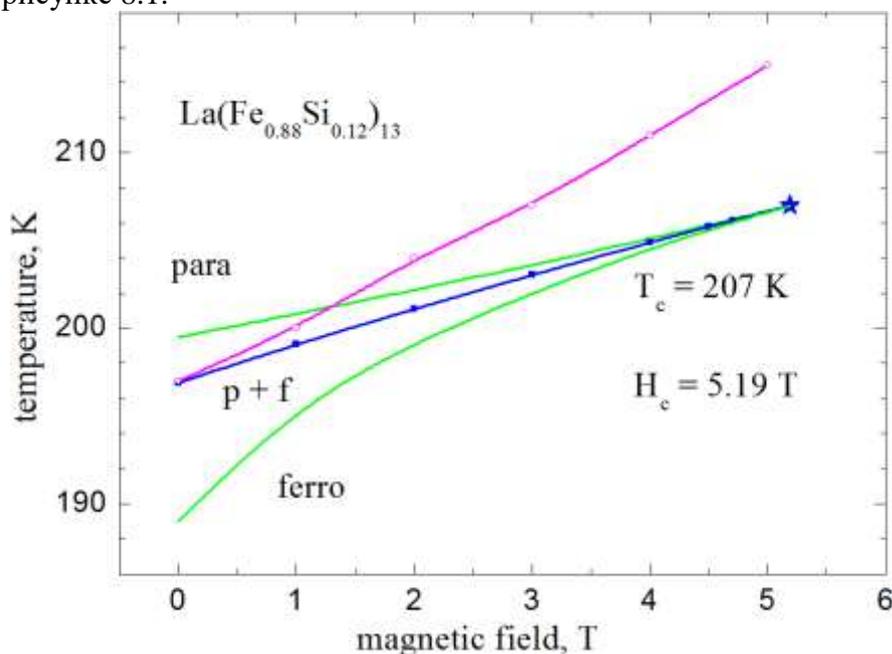


Рисунок 8.1 – Диаграмма магнитного состояния ферромагнетика  $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$  в окрестности критической точки

Зеленым цветом на рисунке 8.1 отмечены спинодали (точки потери абсолютной устойчивости) парамагнитной и ферромагнитной фаз. Синим обозначена линия равновесных фазовых переходов I рода, полученная из условия равенства термодинамических потенциалов для ферромагнитной и парамагнитной фаз. Звездочка – положение критической точки. Пурпурная линия – экспериментальные данные [Influence of pressure on itinerant electron metamagnetic transition in  $\text{La}(\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x})_{13}$  compounds / A. Fujita, K. Fukamishi, M. Yamada, T. Goto.- Текст: непосредственный //J. App. Phys.- 2003.- V.93.- P.7263-7265.]. Точки этой кривой определены как средние значения точек перегиба линий намагничивания при увеличении и уменьшении магнитного поля. Нужно отметить, что критические точки на кривой магнитного фазового перехода I рода наблюдались в квантовых магнитных системах  $\text{Dy}_2\text{Tl}_2\text{O}_7$  и  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ . Там также отмечалась аналогия этих критических точек с критической точкой воды. Далее мы предполагаем изучить возможность существования такой точки в соединениях  $\text{Fe}_x\text{Rh}_{1-x}$ .

Сплавы на основе Fe-Rh также относятся к семейству материалов с магнитным фазовым переходом I рода и сильным магнитоупругим взаимодействием. Методом рентгеновской дифракции с использованием полнопрофильного анализа спектров и привлечением ряда моделей ближнего порядка с последующими расчетами магнитных и электронных свойств установлено, что характеристики магнитного фазового перехода в сплавах Fe-Cr-Rh в значительной степени определяются особенностями распределения атомов Cr по позициям атомов Fe и Rh, возникающими в процессе термической обработки образцов. Непосредственным объектом экспериментальных исследований был сплав  $\text{Fe}_{48}\text{Cr}_3\text{Rh}_{49}$ .

С использованием набора моделей распределения атомов Cr по позициям атомов Fe и Rh были рассчитаны постоянные решеток, объемы элементарных ячеек и расстояния между атомами хрома в этом сплаве, а также величины магнитных моментов атомов железа, родия и хрома для структур с ферромагнитным и антиферромагнитным упорядочением. Для проверки адекватности моделей были приготовлены сплавы  $\text{Fe}_{48}\text{Cr}_3\text{Rh}_{49}$  в быстрозакаленном состоянии и после медленного охлаждения от температуры отжига 1000 °C. Значения постоянных решетки в быстрозакаленных образцах оказались выше, чем в медленно охлаждавшихся, что подтверждает предположение о возникновении локального беспорядка в кристаллической структуре быстро закаленного образца (рисунок 8.2).

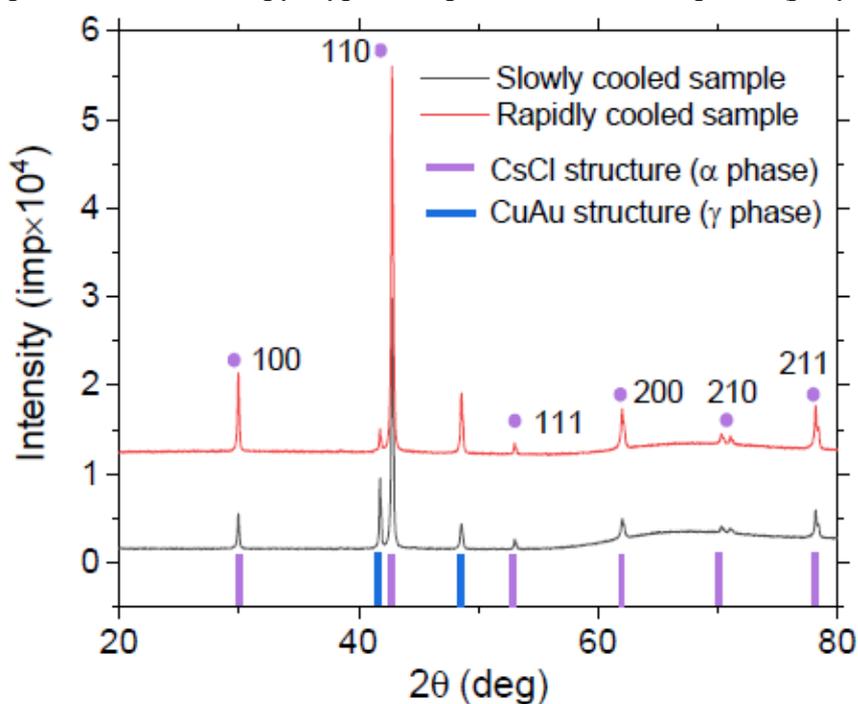


Рисунок 8.2 – Рентгенограммы быстро закаленных и медленно охлажденных образцов  $\text{Fe}_{48}\text{Cr}_3\text{Rh}_{49}$  при комнатной температуре

Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными, полученными на медленно закаленных сплавах, выявило высокую степень согласия с модельной структурой  $\text{Fe}_{50}\text{Cr}_{3.7}\text{Rh}_{46.3}$ , для которой расстояния между атомами хрома были найдены равными  $a = 0.3626$  нм. По контрасту с этим для быстро закаленного сплава реализуется структура, где 8% атомов хрома замещают позиции железа, в то время как оставшиеся атомы оккупируют позиции родия. В этом случае расстояния между атомами хрома варьируются между 0.2343 нм и 0.5258 нм с равной вероятностью.

Таким образом, подтверждено, что изменение характеристик сплава  $\text{Fe}_{50}\text{Cr}_{3.7}\text{Rh}_{46.3}$  в зависимости от скорости закалки обусловлено эффектами особенностей распределения допирующего элемента в кристаллической решетке матрицы. Степенью кристаллического порядка можно управлять, выбирая позиции для размещения легирующего элемента подбором режимов термообработки.

Рост скорости закалки сплава ведет к росту числа дефектов. В свою очередь, рост числа дефектов влияет на магнитные свойства образца через образование зародышей магнитной фазы около локальных дефектов кристаллической решетки и отрицательное химическое давление вследствие присутствия вакансий. В итоге увеличение скорости закалки ведет к уменьшению температуры фазового перехода и критического магнитного поля, а также к росту эффективной константы анизотропии, коэрцитивной силы и величины магнитокалорического эффекта. Т.е. термообработка материала является инструментом для контролируемого тюнинга параметров магнитокалорического эффекта в системе Fe-Rh-Cr.

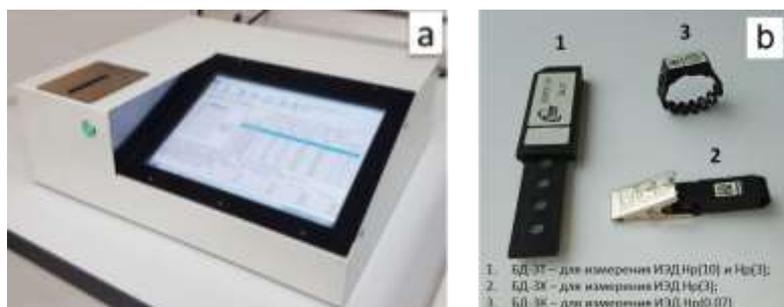
Результаты исследований опубликованы в 2023 году:

Valiev, E.Z. Critical Point in the Curve of First-Order Magnetic Phase Transition / E.Z. Valiev.- Текст: непосредственный // Journal of Experimental and Theoretical Physics.- 2023.- V. 136.- No. 3.- P. 300–304.

Influence of Structural Disorder on the Magnetic Order in FeRhCr Alloys / A.S. Komlev, G.F. Cabeza, A.M. Chirkova, N. Ukrainczyk, E.A. Sherstobitova, V.I. Zverev, R. Gimaev, N.V. Baranov, N.S. Perov.- Текст: непосредственный // Metals.- 2023.- V.13.- P. 1650-1672.

Наиболее важные результаты по теме «РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКИХ МЕТОДОВ, СЕНСОРОВ И ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ СРЕДСТВ КОНТРОЛЯ И ДИАГНОСТИКИ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ»

9.1 Совместно с АО УЭМЗ разработан новый наукоемкий продукт – автоматизированная система индивидуального дозиметрического контроля КОРОС-333 (рисунок 9.1). Система успешно прошла государственные испытания, на которых было подтверждено ее превосходство по совокупности метрологических и технико-эксплуатационных параметров над зарубежными аналогами. Система внесена в государственный реестр средств измерений (№ 87141-22). Для считывания дозиметрической информации в КОРОС-333 впервые в России использован эффект оптически стимулированной люминесценции (ОСЛ), что позволяет в 5-10 раз увеличить скорость считывания, снизить в несколько раз энергопотребление и материалоемкость. КОРОС-333 состоит из ОСЛ-считывателя со встроенным промышленным компьютером, комплекта дозиметров, специализированного программного обеспечения и стирающего устройства. В трех типах разработанных ОСЛ-дозиметров для измерения доз облучения всего тела  $\text{Hr}(10)$ , хрусталика глаза  $\text{Hr}(3)$  и кожных покровов  $\text{Hr}(0.07)$  использованы новые детекторные материалы на основе  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Для дозиметрических приложений, включая нейтронную дозиметрию, изучены литий-магниевые бораты и фторопласты.



а) ОСЛ-считыватель системы

б) три типа дозиметров

Рисунок 9.1 – Система дозиметрического контроля КОРОС-333

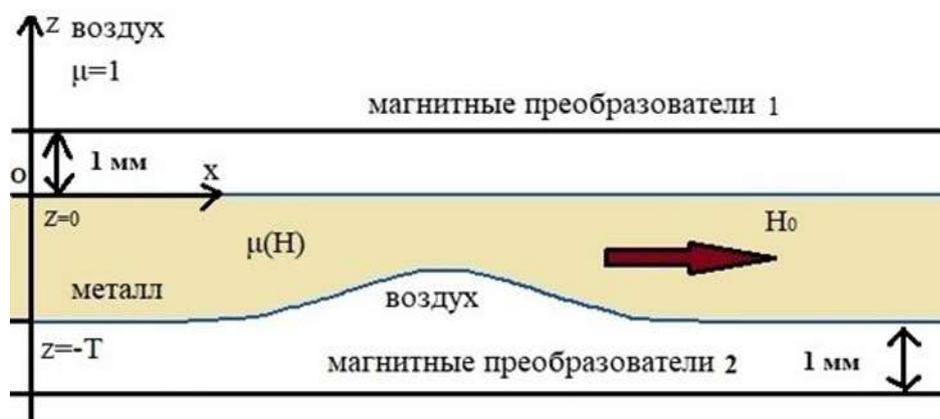
Результаты исследований опубликованы в 2023 году:

Автоматизированная система индивидуального дозиметрического контроля КОРОС-333 / А.И. Сурдо, Р.М. Абашев, В.С. Красноперов, И.И. Мильман, Е.В. Моисейкин, А.И. Бояринцев. – Текст: непосредственный // Дефектоскопия. — 2023. — V. 59. — P. 70—72.

The role of defects in thermoluminescence of pure and rare-earth-doped magnesium tetraborate phosphor / M.O. Kalinkin, D.A. Akulov, R.M. Abashev, A.I. Surdo, M.V. Kuznetsov, D.G. Kellerman. – Текст: непосредственный // Journal of Luminescence. — 2023. — V. 263. — P. 120119—120126.

$\text{Li}_9\text{Mg}_3[\text{PO}_4]_4\text{F}_3$  fluorophosphate as a new thermoluminescent material: Experimental and theoretical study / D.A. Akulov, N.I. Medvedeva, M.O. Kalinkin, V.G. Zubkov, R.M. Abashev, A.I. Surdo, E.V. Zabolotskaya, D.G. Kellerman. – Текст: непосредственный // Optical Materials. — 2023. — V. 145. — P. 114418—114427.

9.2 Разработана методика приближенного решения обратной геометрической задачи магнитостатики для пластины из ферромагнетика в магнитном поле как для случая расположения магнитных преобразователей непосредственно над поверхностным дефектом потери сплошности металла, так и для случая, когда магнитные преобразователи расположены над бездефектной поверхностью пластины. Возможные расположения преобразователей (датчиков) поля рассеяния показаны на рисунке 9.2. В обоих случаях рассмотрен практически реализуемый односторонний доступ. Определены ограничения на форму и размеры поверхностных коррозионно-подобных дефектов, для которых предлагаемая методика дефектометрии работает надежно. Показано, что предлагаемая методика может быть практически реализована с помощью мобильных сканирующих устройств и использована для дефектометрии протяженных объектов в условиях эксплуатации (например, бурильных труб на буровых площадках).



Сечение пластины плоскостью, перпендикулярной прямой, вдоль которой вытянут дефект. Ось  $OY$  направлена перпендикулярно плоскости чертежа так, чтобы все три оси образовывали правую тройку. Поле намагничивания направлено вдоль оси  $OX$ .  $\mu(H)$  – магнитная проницаемость ферромагнетика.

Рисунок 2 – Возможные расположения преобразователей (датчиков) поля рассеяния

Результаты исследований опубликованы в 2023 году:

Range of Applicability of a Technique for Constructing Magnetic Induction Lines for Flaw Sizing in Extended Objects / A. V. Nikitin, A. V. Mikhaylov, L. V. Mikhaylov, Yu. L. Gobov, V. N. Kostin, Ya. G. Smorodinskii. – Текст: непосредственный // Russian journal of nondestructive testing. — 2023. — V. 59. — P. 1297—1305.