

Результаты исследований ИФМ УрО РАН 2022 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 Проведены измерения термоЭДС (S) и удельного электрического сопротивления (ρ) монокристаллов SnSe при всестороннем сжатии под давлением до 9 ГПа при комнатной температуре. Установлено, что термоэлектрический коэффициент мощности $PF=S^2\sigma$ кристаллов значительно увеличивается под давлением 5 ГПа, причем данный эффект усиливается при повторном сжатии образцов под давлением, что, в итоге, приводит к повышению коэффициента PF до приблизительно $180 \text{ мкВт}\cdot\text{К}^{-2}\text{см}^{-1}$. После обработки высоким давлением, образцы SnSe были исследованы с применением методов рентгеновской дифракции, БИК-спектроскопии и ПЭМ ВР. Обнаружено, что при квазигидростатическом сжатии монокристаллы SnSe испытывают существенную пластическую деформацию и переходят в необычное кристаллическое состояние. Это приводит к значительному уменьшению ширины запрещенной зоны E_g от 0.83 до 0.50 эВ (в условиях нормального давления) и модификации термоэлектрических свойств. Полученные результаты, указывают на эффективность стратегии улучшения эксплуатационных параметров халькогенидных термоэлектриков путём их деформации в условиях высокого давления.

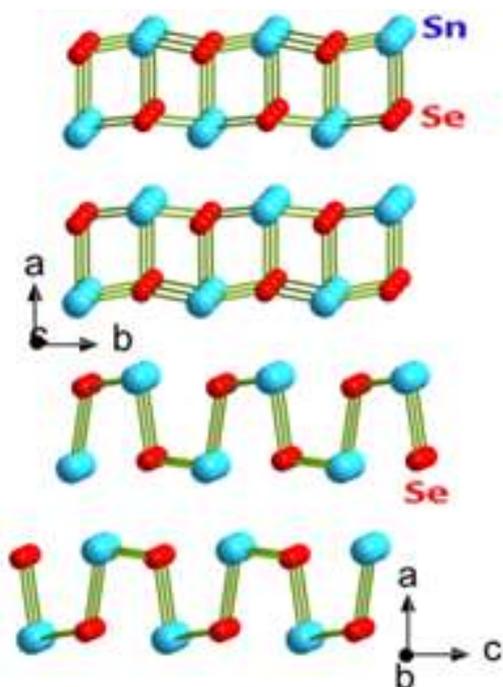


Рисунок 1.1а – Слоистая кристаллическая $Pnma$ -структура SnSe в различных кристаллографических проекциях

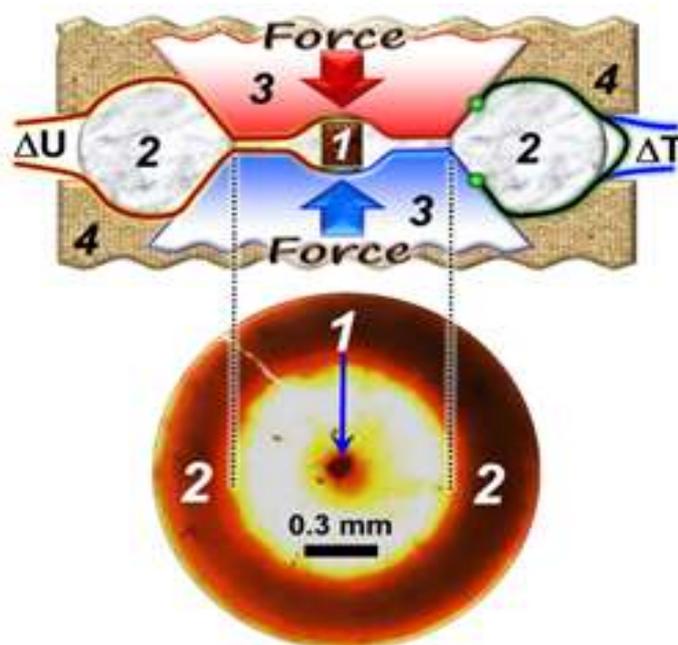


Рисунок 1.1б – вид камеры высокого давления (4) с твердосплавными наковальнями (3) в разрезе и фотография образца (1) в известняковом контейнере (2), извлеченном из камеры ВД после эксперимента

Результаты опубликованы в 2022 году:

Giant Room-Temperature Power Factor in p-Type Thermoelectric SnSe under High Pressure [Текст] / N.V. Morozova, I.V. Korobeynikov, N. Miyajima, S.V. Ovsyannikov. – Текст: непосредственный // Advanced Science. — 2022. — V. 9. — P. 2103720—2103729.

1.2 В рамках метода DFT+DMFT проводилось исследование свойств недавно синтезированного оксида Fe_4O_5 ($\text{Fe}^{2.5+}$, структура вида CaFe_3O_5) в области давлений ~ 100 ГПа, дополненное результатами рентгеновской дифракции высокого разрешения и измерениями сопротивления (экспериментальные измерения выполнены в группе G. Kh. Rozenberg, Tel Aviv). В области низких давлений Fe_4O_5 представляет собой диэлектрик с узкой запрещенной зоной, характеризующийся зарядовым упорядочением (CO) Вервей-типа структурно отличных ионов Fe. Под давлением Fe_4O_5 претерпевает серию изоструктурных электронных и магнитных переходов, с аномальным компрессионным поведением выше приблизительно 50 ГПа. Расчеты, в согласии с экспериментом, показывают сайт-зависимый коллапс локальных магнитных моментов при приблизительно 50 ГПа с последующим сайт-селективным переходом диэлектрик-металл при приблизительно 84 ГПа на октаэдрических узлах Fe (валентность призматических ионов Fe меняется с 2+ на 3+, при этом электронное состояние данных ионов остается диэлектрическим). Было дано микроскопическое описание зарядового упорядочения в Fe_4O_5 , характеризующегося сложной конкуренцией различных CO паттернов в области низких температур. В дополнение, в рамках DFT+DMFT была вычислена электронная структура и фазовое равновесие системы CaFeO_3 . Было показано, что CaFeO_3 является диэлектриком с отрицательным переносом заряда, который характеризуется сильной локализацией $3d$ электронов. Показано, что соединение кристаллизуется в моноклинной структуре с кооперативным «breathing-mode» искажением решетки. При этом формируется связь-диспропорционированное состояние ионов Fe A $3d^{5-\delta}L^{2-\delta}$ и Fe B $3d^5$ с $\delta < 1$. При сжатии выше приблизительно 41 ГПа CaFeO_3 претерпевает фазовый переход диэлектрик-металл, сопровождающийся структурным превращением и подавлением «breathing-mode» искажения решетки. Показано, что переход диэлектрик-металл связан с орбитально-зависимой делокализацией $3d$ электронов.

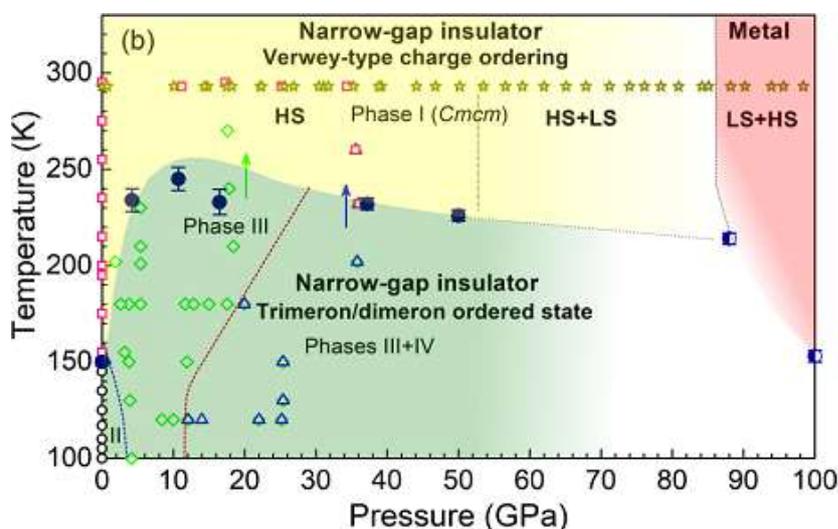


Рисунок 1.2 – Фазовая диаграмма давление-температура для Fe_4O_5

Результаты опубликованы в 2022 году:

Leonov, I. Metal-insulator transition and local-moment collapse in negative charge transfer CaFeO_3 under pressure [Текст] / I. Leonov // Physical Review B. – 2022. – V. 105. – P. 35157–35165.

Verwey-Type Charge Ordering and Site-Selective Mott Transition in Fe_4O_5 under Pressure [Текст] / S. Layek, E. Greenberg, S. Chariton, M. Bykov, E. Bykova, D. M. Trots, A. V. Kurnosov, I. Chuvashova, S. V. Ovsyannikov, I. Leonov, G. Kh. Rozenberg // Journal of the American Chemical Society. — 2022. — V. 144. — P. 10259—10269.

1.3 Метод XPS-визуализации структурных дефектов использован для изучения температурной зависимости фотохимической деградации MAPbI_3 и MAPbBr_3 перовскитов. На основе измерений XPS обзорных спектров и спектров остовных уровней обнаружен эффект повышения устойчивости гибридных перовскитов к облучению видимым светом при снижении температуры испытаний от 60°C до 10°C , что обеспечивает долговременное использование солнечных элементов на их основе при низких температурах без модификации состава и структуры. Получение этого результата ставит необходимость пересмотра международного температурного сертификата солнечных батарей IEC61215:2016 для районов Сибири и Крайнего Севера, где снежный покров и низкие температуры сохраняются 7 и 9 месяцев в году, соответственно. На рисунке 1.3 показана XPS-визуализация, демонстрирующая исчезновение фотохимической деградации с образованием PbI_2 -продукта разложения при уменьшении температуры.

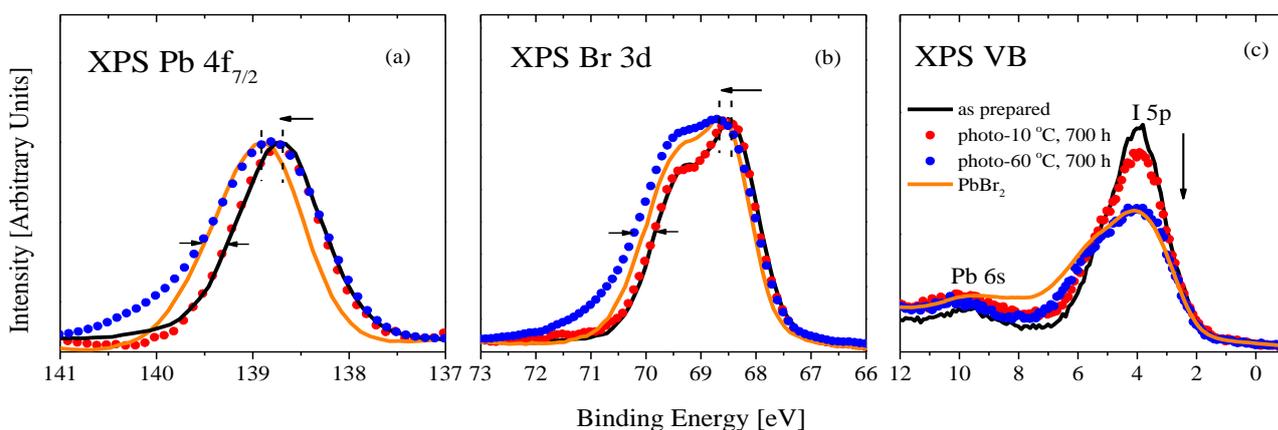


Рисунок 1.3 – XPS Pb 4f (a), I 3d (b) остовных уровней и VB-валентной полосы (c) MAPbBr_3 -перовскита до и после облучения видимым светом при 60°C и 10°C в течение 700 часов

Результаты опубликованы в 2022 году:

Nanoscale Visualization of Photodegradation Dynamics of MAPbI_3 Perovskite Films [Текст] / Nikita A. Emelianov, Victoria V. Ozerova, Ivan S. Zhidkov, Denis V. Korchagin, Gennady V. Shilov, Alexey L. Litvinov, Ernst Z. Kurmaev, Lyubov A. Frolova, Sergey M. Aldoshin, Pavel A. Troshin // Journal of Physical Chemistry Letters. — 2022. — V. 13. — P. 2744—2749.

Temperature Dependence of Photochemical Degradation of MAPbBr_3 Perovskite [Текст] / Ivan S. Zhidkov, Azat F. Akbulatov, Marina I. Ustinova, Andrey I. Kukharenko, Lyubov A. Frolova, Seif O. Cholakh, Chu-Chen Chueh, Pavel A. Troshin, Ernst Z. Kurmaev // Coatings. — 2022. — V. 12. — P. 1066—1072.

1.4 Впервые получены экспериментальные данные об упругих свойствах монокристаллов металл-органических (гибридных) перовскитов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ в широком диапазоне температур. Вблизи температуры фазового перехода из тетрагональной в орторомбическую фазу (T_c приблизительно 160 К) обнаружено anomalous поведение упругих свойств - скачок скорости звука, резкий рост поглощения, узкий гистерезис. Дана интерпретация этих аномалий в рамках теории Ландау для фазовых переходов 1-го рода с квадратичной связью параметра порядка с деформациями и учета флуктуаций параметра порядка. Вблизи T_c приблизительно 160 К в спектрах фототока и фотолюминесценции обнаружен резкий сдвиг края поглощения на величину 110 мэВ, свидетельствующий о корреляции оптических свойств с фазовым переходом. В спектрах фотолюминесценции в орторомбической фазе (T менее 160 К) выявлена многокомпонентная эмиссия, установлена ее природа и предложена схема излучательной рекомбинации. Обнаружена сложная структура приповерхностной области кристаллов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, обусловленная воздействием температуры и облучения. Полученные данные могут быть использованы при разработке оптоэлектронных устройств, созданных на базе гибридных перовскитов.

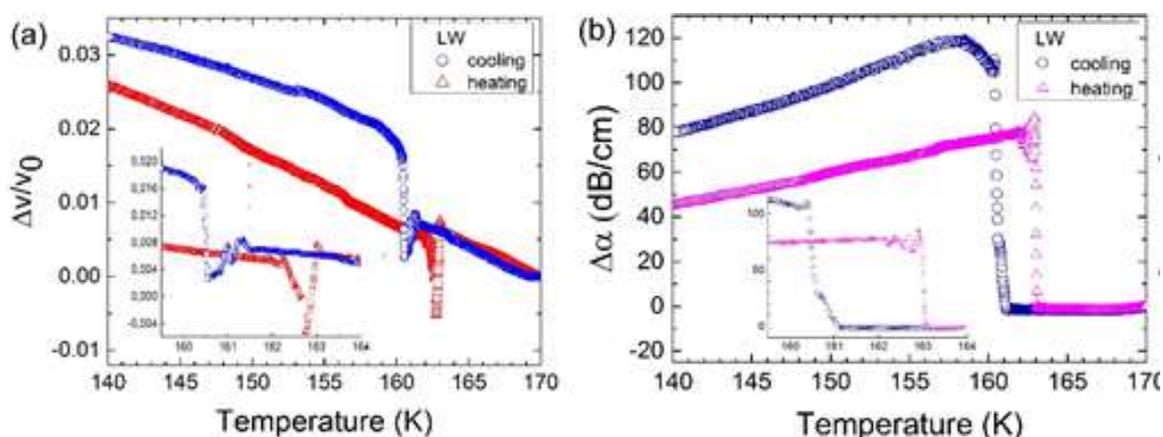


Рисунок 1.4 – Температурные зависимости (а) скорости $\Delta v = v - v_0$, $v_0 = v(170 \text{ К})$. (б) поглощения $\Delta \alpha = \alpha - \alpha(170 \text{ К})$ продольных ультразвуковых волн в монокристалле $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ вблизи фазового перехода

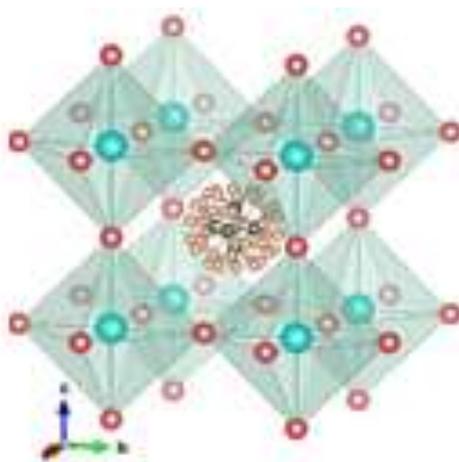
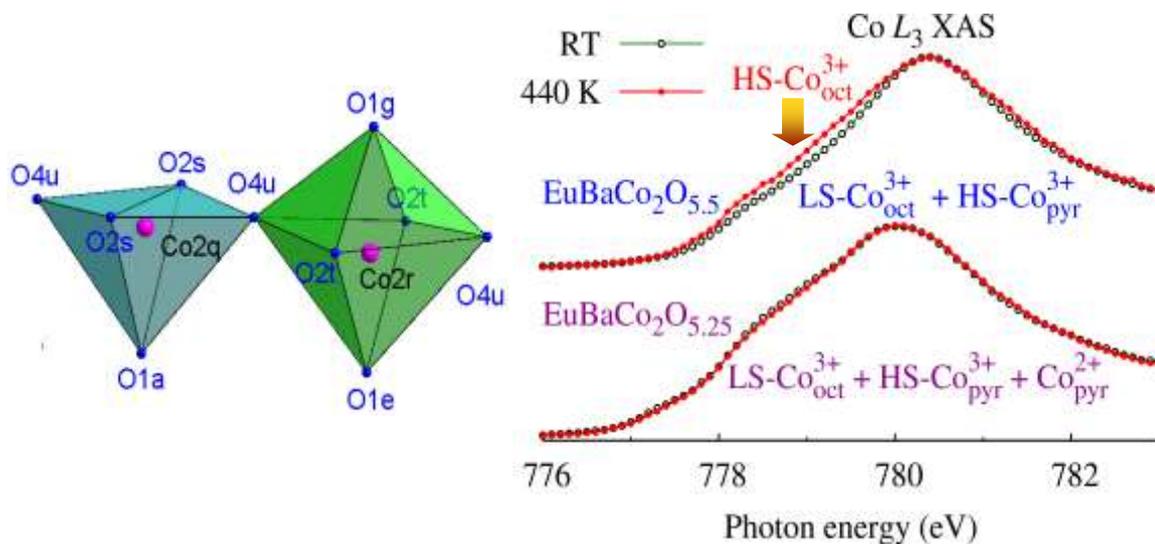


Рисунок 1.5 – Структура гибридного перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ в кубической фазе с указанием всех ориентаций катиона CH_3NH_3

Результаты опубликованы в 2022 году:

Low-temperature luminescence in organic-inorganic lead iodide perovskite single crystals [Текст] / I.V. Zhevstovskikh, N.S. Averkiev, M.N. Sarychev, O.I. Semenova, O.E. Tereshchenko // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2022. — V. 55. — P. 95105—95114.

1.5 С помощью рентгеновских абсорбционных Co *L*-спектров, измеренных при температурах 300 и 440 К, *подтвержден спиновый переход* в слоистых кобальтитах. Экспериментально показано, что часть ионов Co³⁺ в CoO₆-октаэдрах кобальтитов EuBaCo₂O_{5.5} с повышением температуры переходит из низкоспинового состояния в высокоспиновое. Для кобальтита EuBaCo₂O_{5.25}, отличающегося большим соотношением количества CoO₅-пирамид к количеству CoO₆-октаэдров, изменения спинового состояния ионов Co³⁺ не найдены. Полученные результаты демонстрируют высокую эффективность рентгеновской спектроскопии, отличающейся селективностью к атомам избранного сорта, для установления изменений спиновых состояний ионов переходного элемента.



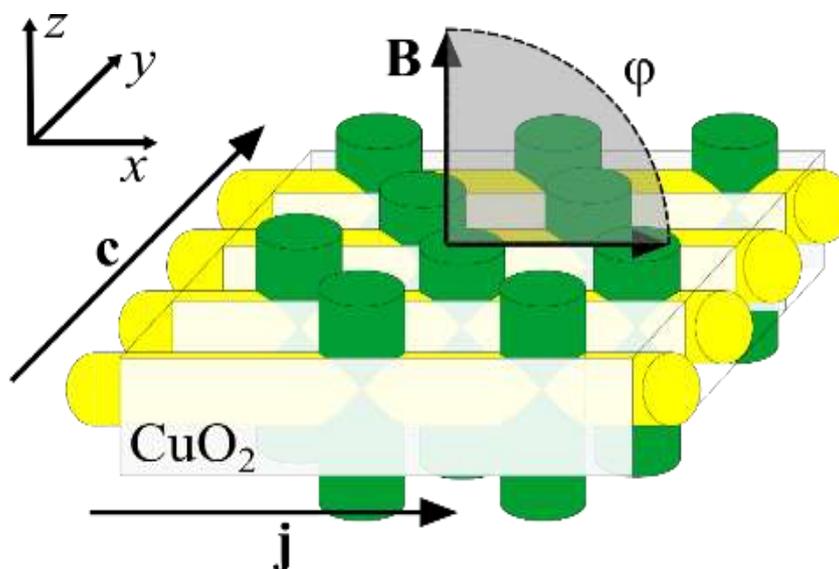
Стрелка показывает вклад в спектр сигналов от высокоспиновых Co³⁺-ионов в октаэдрах.

Рисунок 1.6 – Кристаллическая структура и рентгеновские абсорбционные Co *L*₃-спектры EuBaCo₂O_{5.5} и EuBaCo₂O_{5.25}, измеренные при комнатной температуре и при 440 К

Результаты опубликованы в 2022 году

X-Ray Absorption Co L Spectra for the Determination of the Charge and Spin States of Cobalt Ions in LnBaCo₂O₅ + δ Cobaltites (Ln = Eu, Gd, Tb) [Текст] / V.R. Galakhov, M.S. Udintseva, S.V. Naumov, S.N. Shamin, B.A. Gizhevskii // JETP Letters. – 2022. — V. 116. — P. 367—371.

1.6 В результате проведенных транспортных и гальваномагнитных исследований в анизотропных сверхпроводящих системах в области фазовых переходов получены данные, подтверждающие определяющую взаимосвязь анизотропии кристаллической структуры изученных систем и анизотропии электронных корреляций, которые приводят к появлению либо исчезновению фазового упорядочения при изменении внешних воздействий [8]. Полученные результаты успешно интерпретируются в рамках концепции квазидвумерности изучаемых систем с высокой металлической проводимостью в проводящих плоскостях CuO_2 ($d\rho_{ab}/dT > 0$) и неметаллической температурной зависимостью проводимости в направлении оси c ($d\rho_c/dT < 0$) из-за некогерентного туннелирования и термической активации через барьеры между проводящими слоями CuO_2 . Особенности поведения магнитосопротивления $\rho_{xx}(B)$ и сопротивления Холла $\rho_{xy}(B)$ в смешанном (резистивном) состоянии связаны с динамикой поперечного движения вихрей Абрикосова и Джозефсона в режиме потока в скрещенных электрическом и магнитном полях.



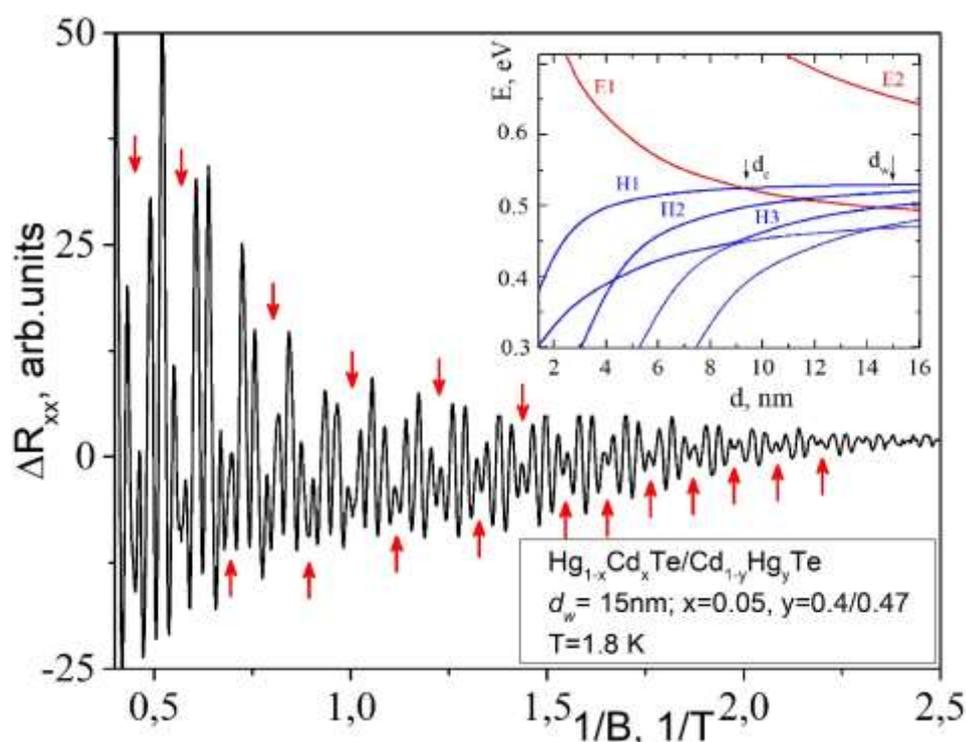
Угол $0 < \varphi < 90^\circ$ между электрическим током и магнитным. Зеленые цилиндры - джозефсоновские вихри для перпендикулярной компоненты магнитного поля, желтые цилиндры - джозефсоновские вихри для параллельной компоненты магнитного поля.

Рисунок 1.7 – Схематическая структура ориентации вихрей при определенной конфигурации электрического тока и магнитного поля: электрический ток (j) и магнитное поле (B) параллельны плоскостям CuO_2

Результаты опубликованы в 2022 году

The Interplay of the Charge and Vortex Subsystems in Anisotropic Electron-Doped Superconductor $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [Текст] / A. S. Klepikova, O. E. Petukhova, M. R. Popov, N. G. Shelushinina, T. B. Charikova // Physics of Metals and Metallography. — 2022. — V. 123. — P. 114—137.

1.7 В асимметрично легированных гетероструктурах с квантовыми ямами HgCdTe одинаковой ширины, но за счет вариаций состава обладающими разным типом зонного спектра, нормальным и инвертированным, обнаружено гигантское спин-орбитальное расщепление Рашбы (Δ_R приблизительно 30 мэВ). Параметры спин-орбитального взаимодействия определены из исследований осцилляций Шубникова-де-Гааза (ШдГ) по концентрации носителей в спин-расщепленных подзонах, найденной из Фурье-анализа, и из анализа положения узлов биений как в слабых магнитных полях, так и в широком диапазоне магнитных полей. Найденное расщепление оказалось одинаковым для квантовых ям с тривиальным и с инверсным порядком зон, что связано со значительной долей состояний р-типа в нижней подзоне их зоны проводимости, что наряду с сильной структурной асимметрией квантовых ям и высокой концентрации электронов отвечает за столь большое значение Δ_R .



Стрелками показано положение узлов биений осцилляций ШдГ. На вставке: энергии размерно-квантовых подзон при $k = 0$ в зависимости от ширины квантовой ямы.

Рисунок 1.8 – Зависимость осциллирующей части продольного сопротивления ΔR_{xx} от обратного магнитного поля $1/B$ для образца $Hg_{0.95}Cd_{0.05}Te/Cd_{0.53}Hg_{0.47}Te$ с инвертированным зонным спектром

Результаты опубликованы в 2022 году

Rashba Spin Splitting in HgCdTe Quantum Wells with Inverted and Normal Band Structures [Текст] / Svetlana V. Gudina, Vladimir N. Neverov, Mikhail R. Popov, Konstantin V. Turutkin, Sergey M. Podgornykh, Nina G. Shelushinina, Mikhail V. Yakunin, Nikolay N. Mikhailov, Sergey A. Dvoretzky // Nanomaterials. — 2022. — V. 12. — P. 1238—1252.

1.8 В двойной квантовой яме, состоящей из двух слоев HgTe толщиной 8.5 нм, немногим большей критической величины 6.3 нм, разделенных барьером 3 нм, обнаружена ступенеобразная структура холловского магнитосопротивления $\rho_{yx}(B)$ с почти вертикальным ростом вокруг нуля и дальнейшим ходом, близким к h/e^2 . Особенностью зонного спектра данной структуры является наличие острого максимума в центре зоны Бриллюэна, расположенного близко по энергии к боковому максимуму. Показано, что наблюдаемый резкий рост $\rho_{yx}(B)$ вблизи нуля согласуется с исчезающе малой концентрацией легких дырок в этом максимуме на фоне большой концентрации малоподвижных дырок в боковых максимумах, а выход на первое плато квантового эффекта Холла уже в слабых магнитных полях связан со специфической картиной уровней Ландау. Обнаружена высокая чувствительность наблюдаемой структуры $\rho_{yx}(B)$ к воздействиям (перпендикулярное слоям электрическое поле, параллельное магнитное поле), что согласуется с изменением тонкого баланса положений центрального и бокового максимумов. Показано, что это свойство обусловлено наличием в двойной квантовой яме своеобразного дипольного момента, отличающего ее от одиночной ямы с похожими особенностями зонного спектра, где реакция на воздействия несопоставимо слабее.

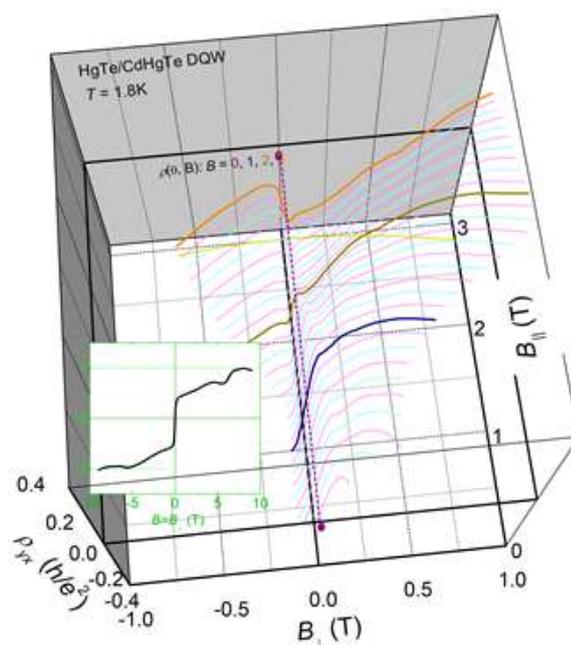


Рисунок 1.9 – Ступенеобразное холловское магнитосопротивление и его эволюция с добавлением параллельной слоям компоненты магнитного поля

Результаты опубликованы в 2022 году

Features of Magnetotransport in a HgTe/CdHgTe Double Quantum Well with an Intermediate Degree of Band Inversion [Текст] / М. V. Yakunin, V. Ya. Aleshkin, S. M. Podgornykh, V. N. Neverov, M. R. Popov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky // JETP Letters. — 2022. — V. 116. — P. 385—393.

1.9 В работе зарегистрированы линии a , b , c , d и край примесного поглощения ZnMnO для σ - и π -поляризаций света в интервале температур (7 – 300) К. Интенсивные линии a_π и a_σ (рисунок 1.10) уверенно наблюдаются в интервале (7-100) К, другие линии – только при низких температурах [11]. Для определения типа оптических переходов, которым соответствуют данные экситонные линии был произведён расчёт силы осциллятора наиболее интенсивных линий. Линии a , b , c , d анализировались в модели кластера Mn^{2+} - 4O^{2-} . Оптические переходы происходят из антисвязывающих ($p+d^5$)-состояний в запрещённой щели в состояние, отщеплённое от дна зоны проводимости. ZnMnO . Наблюдаемые линии a , b , c , d в кластере интерпретированы как локализованные экситоны.

Существует несколько моделей локализованных экситонов в кристаллах II – VI:3d. Часто такие экситоны называют экситонами с переносом заряда. Для примера будем рассматривать кристалл ZnSe:Ni . В этом случае электрон под влиянием света переходит из валентной зоны на 3d примесь, изменяя её конфигурацию d^8 - d^9 . Это будет сильно локализованный носитель. Дырка будет слабо локализованным носителем и двигается по кристаллу на каком-то расстоянии от примесного центра. Такая электронно-дырочная пара представляет локализованный экситон на примеси Ni^{2+} . Оптические переходы с образованием локализованного экситона маловероятны и оцениваются как магнитодипольные. Существенным свойством локализованных экситонов является схема их распада. Она реализуется по модели Оже релаксации, в результате которой локализованный экситон распадается под влиянием электрического поля, а его энергия трансформируется во внутрицентровое возбуждение dn конфигурации примеси, на которой локализован экситон. Если примесь не имеет переходов с переносом заряда, то образование локализованного экситона описывается более сложно. В монокристалле ZnMnO существует несколько типов локализованных экситонов, названных a , b , c и d .

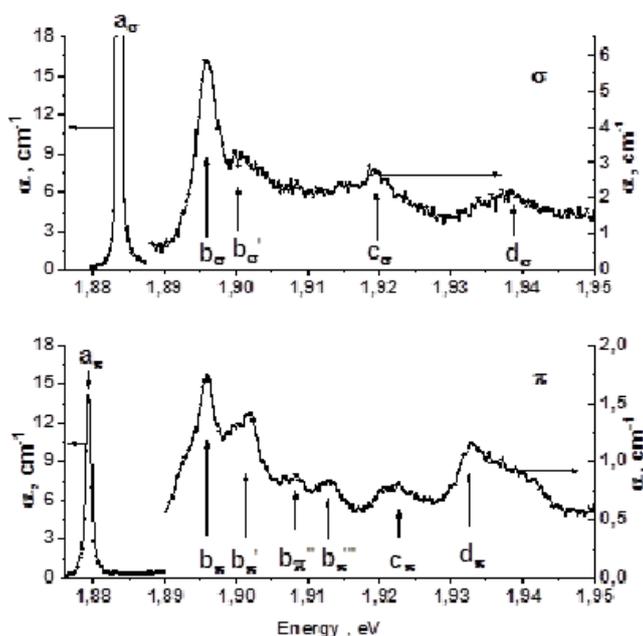


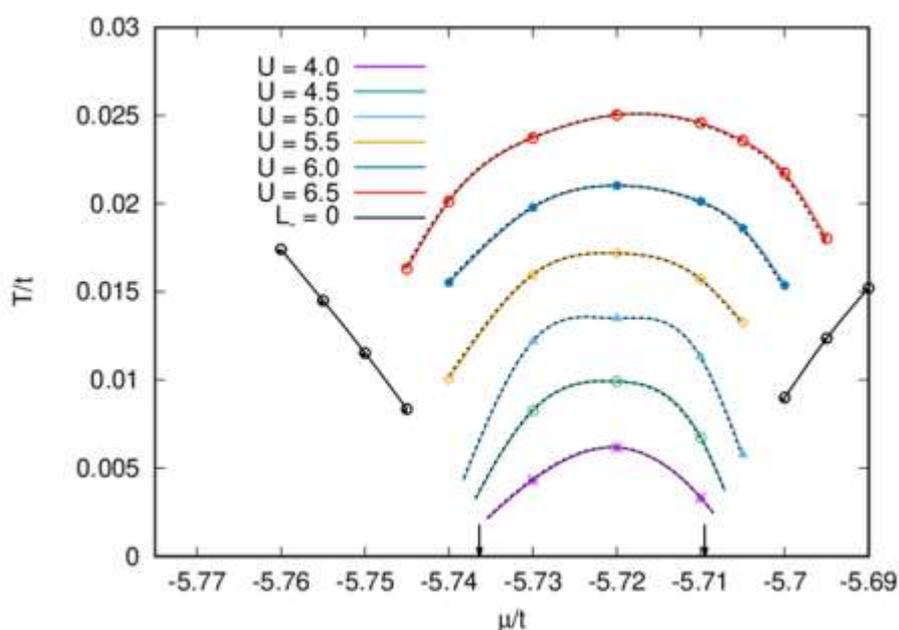
Рисунок 1.10 – Спектры оптического поглощения монокристаллов ZnMnO в области линий локализованных экситонов для σ - и π -поляризаций при $T=7$ К

Результаты опубликованы в 2022 году

Локализованные экситоны в ZnMnO [Текст] / В.И. Соколов, Н.Б. Груздев, В.В. Меньшенин, А.С. Вохминцев, С.С. Савченко, И.А. Вайнштейн, Г.А. Емельченко // Оптика и спектроскопия. — 2022. — V. 130. — P. 1810—1816.

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 Проанализирован электронный спектр гранцентрированной кубической решетки в приближении ближайших и следующих за ближайшими соседями. Найдены все варианты для соотношения интегралов переноса, обеспечивающие гигантскую сингулярность ван Хова плотности в электронных состояний. Получено выражение для плотности электронных состояний в виде двукратного интеграла и разработан алгоритм его вычисления, который позволяет определить плотность электронных состояний с высокой точностью, недоступной в рамках стандартного метода тетраэдров, применяемого для первопринципных расчетов. Спектр ГЦК решетки использован в рамках метода функциональной ренормгруппы для исследования фазовой диаграммы модели Хаббарда с невырожденной зоной как модели зонного ферромагнетика. Показано, что при удалении уровня Ферми от уровня сингулярности ван Хова температура Кюри скачком обращается в нуль, что указывает на переход первого рода парамагнетик-ферромагнетик.



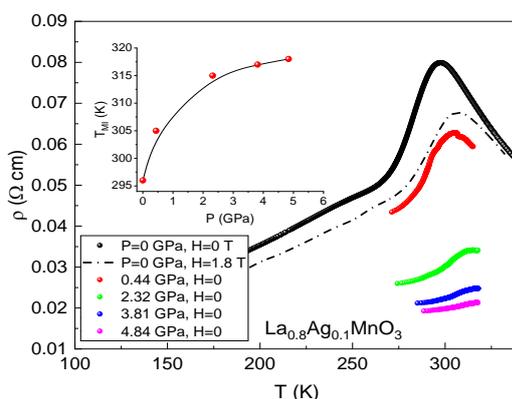
Параметры решетки $\tau=1.05$, где $\tau = t'/t$ (t/t'' - интеграл переноса между первыми/вторыми соседями), полученной в рамках метода функциональной ренормгруппы (fRG). Линия $L_-(q=0) = 0$ определяет линию обращения T_c в нуль скачком (переход первого рода). Пунктиром показан результат приближения случайных фаз (RPA) при выборе $U=U_{\text{eff}}$, обеспечивающим равенство температур Кюри при $\mu=-5.72t$, соответствующему центру плато.

Рисунок 2.1 – Фазовая диаграмма в переменных уровень Ферми μ - температура Кюри T_c для невырожденной модели Хаббарда для ГЦК решетки

Результаты опубликованы в 2022 году:

Igoshev, P.A. Giant density-of-states van Hove singularities in the face-centered cubic lattice [Текст] / P.A. Igoshev, V.Yu. Irkhin // Physics Letters A. — 2022. — V. 438. — P. 128107—128112.

2.2 В гранулированном керамическом манганите $\text{La}_{0.8}\text{Ag}_{0.1}\text{MnO}_3$ исследовано влияние высокого гидростатического давления до 8.5 ГПа на транспортные свойства вблизи температуры перехода от металлического к полупроводниковому типу проводимости (T_M) (рисунок 2.2). Вблизи температуры 296 К, максимума величины колоссального магнитосопротивления, на логарифмической зависимости удельного сопротивления от приложенного давления $\ln(\rho(P))$ обнаружена аномалия в виде излома линейного хода барической зависимости сопротивления при $P_C=3.85$ ГПа (рисунок 2.3). Создана модель, описывающая механизмы рассеяния в гранулированных манганитах. Показано, что обнаруженный переход в точке P_C связан с существованием в керамическом образце двух процессов рассеяния – внутризернового и приграничного. Вблизи P_C оба процесса рассеяния вносят сравнимые по величине вклады в удельное сопротивление. Для давлений меньше 3.85 ГПа преобладает вклад в сопротивление от механизмов рассеяния в приграничных слоях зерен, а для высоких давлений преобладает вклад от области однородного зерна.



На вставке – зависимость T_M от приложенного давления

Рисунок 2.2 – Зависимость удельного электросопротивления от температуры при $P=0$, 0.44, 2.32, 3.81 и 4.84 ГПа

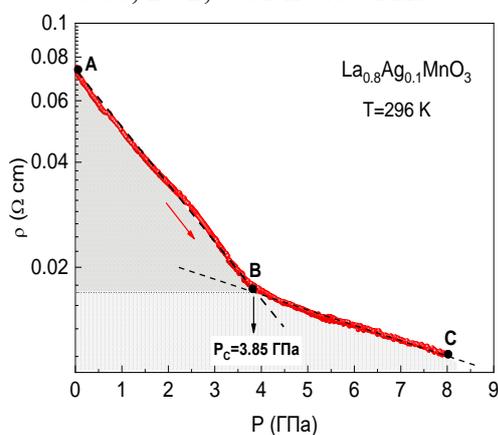


Рисунок 2.3 – зависимость удельного электросопротивления от приложенного давления при $T=296$ К

Результаты опубликованы в 2022 году:

Gudin, S. A. Anomalous Change in the Size of a Spin Polaron in the Paramagnetic Temperature Range in $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$ [Текст] / S. A. Gudin // *Physics of the Solid State*. — 2022. — V. 64. — P. 6—10.

Effect of Hydrostatic Pressure on the Resistivity of $\text{La}_{0.8}\text{Ag}_{0.1}\text{MnO}_3$ Ceramic near TC [Текст] / A. G. Gamzatov, S. A. Gudin, T. R. Arslanov, M. N. Markelova, A. R. Kaul // *JETP Letters*. — 2022. — V. 115. — P. 190—195.

2.3 Показано, что при падении на поверхность диэлектрика стохастических потоков разноименных ионов (интерфейс с плазмой или электролитом, ионное напыление, фотоэффект) на ней возникают флуктуирующие зарядовые пятна в основном субмикронных размеров. Соответственно, над поверхностью появляется тонкий слой пульсирующих электрических полей, создаваемых этими пятнами. Их напряженность E непосредственно над поверхностью может составлять миллионы В/м, но с высотой H падает экспоненциально $E \propto \exp(-H/D)$, где D – характерный размер зарядовых пятен. Времена жизни флуктуирующих пятен τ обратно пропорциональны D и плотности w стохастических потоков ионов/электронов. Амплитуда флуктуаций плотности заряда σ и напряженности поля над пятном $E = (2\varepsilon_0)^{-1} \sigma$ пропорциональны $D^{-3/2}$ и не зависят от w .

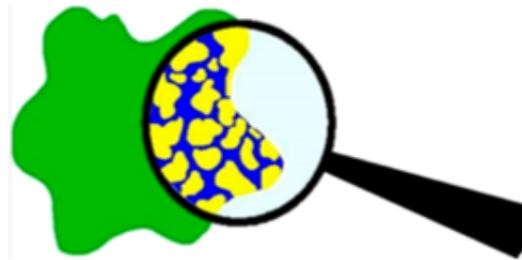


Рисунок 2.4 – Субмикронные зарядовые пятна на (в среднем) однородно заряженной плоскости

Результаты опубликованы в 2022 году:

Rosenfeld, E. V. Charge Fluctuations on a Flat Interface between Dielectric and Electrolyte or Dense Plasma [Текст] / E. V. Rosenfeld, A. V. [Zakharov](#), V. V. [Djakin](#) // Langmuir. — 2022. — V. 38. — P. 9382—9388.

2.4 Предложена процедура аналитического описания новых типов солитонов и диспергирующих нелинейных волн в полуограниченной ферромагнитной пленке при частичном закреплении спинов на ее границе. Показано, что солитоны делятся на два типа. Солитоны первого из них представляют локализованные вблизи края пленки колебания намагниченности с дискретными частотами. Числом таких солитонов можно управлять, изменяя характер закрепления поверхностных спинов. Собственные частоты солитонов и их модуляционные свойства допускают экспериментальную проверку. Вторым типом составляют движущиеся солитоны, которые сильно деформируются при столкновении с краем пленки, а при удалении от нее восстанавливают форму, характерную для неограниченной среды. Измерение сдвига фазы прецессии солитона после его упругого отражения от границы можно использовать для диагностики степени закрепления краевых спинов. Получены новые законы сохранения для солитонов, которые обеспечивают выполнение верных краевых условий.

Результаты опубликованы в 2022 году:

Kiselev, V.V. Interaction of solitons with the boundary of a ferromagnetic plate [Текст] / V.V. Kiselev, A.A. Raskovalov // Journal Of Experimental And Theoretical Physics. — 2022. — V. 135. — P. 676—689.

2.5 Найдено критическое поведение функции линейного отклика на внешнее неоднородное переменное магнитное поле в тетрагональных магнитных кристаллах вблизи магнитных переходов беспорядок- порядок. Показано, что приведенная скейлинговая функция для функции линейного отклика может быть определена как обратная величина к ренормированной одночастично неприводимой функции Грина, вычисляемой по теории возмущений. Из решения ренормгруппового уравнения для связной функций Грина, соответствующей линейному отклику, установлены критические индексы этой функции. Это позволяет описать критическое поведение плотности магнитного момента и магнитной восприимчивости системы вблизи указанных переходов.

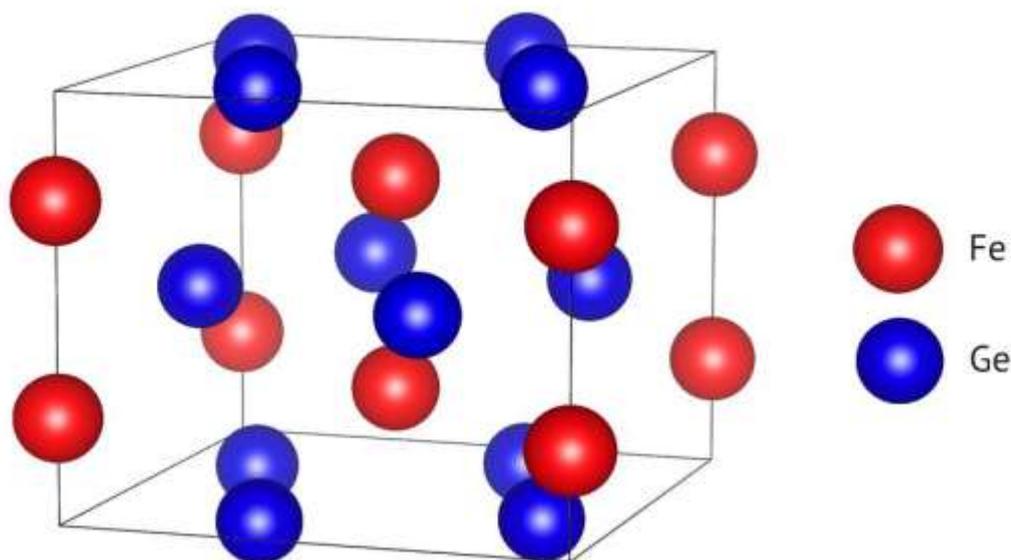
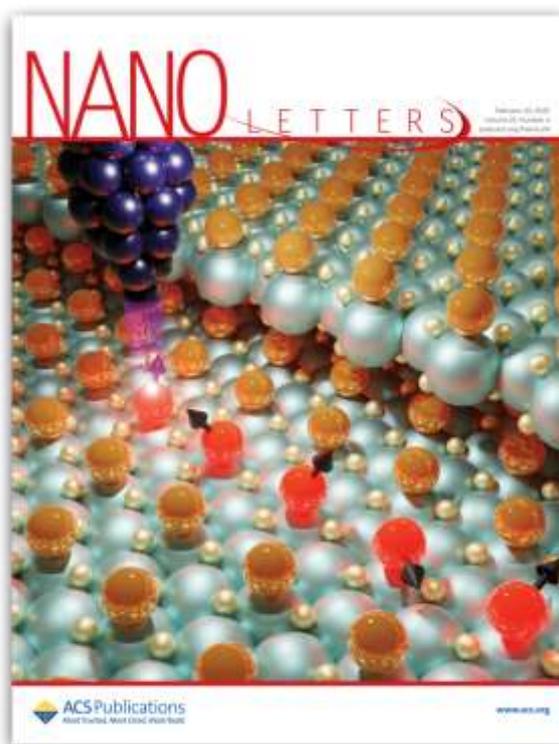


Рисунок 2.5 – Пример слоистого тетрагонального кристалла FeGe_2

Результаты опубликованы в 2022 году:

Men'shenin, V. V. Critical Dynamics of Sound Propagation and Response Function Near Phase Transitions to Incommensurate Magnetic Phases in Layered Media with a Tetragonal Structure [Текст] / V. V. Men'shenin // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. — 2022. — V. 35. — P. 2217—2223.

2.6 Манипулирование зарядовыми и спиновыми состояниями отдельных атомов — одна из актуальных задач современной физики конденсированного состояния. В данной работе изучался дихалькогенид NbS_2 , на $1/3$ интеркалированный атомами Co . При такой концентрации атомы Co образуют треугольную решетку между слабосвязанными слоями NbS_2 , и рассматриваемый материал можно сколоть таким образом, чтобы внешним слоем оказался слой из атомов Co , который можно изучать с помощью сканирующего туннельного микроскопа (STM). Теоретические расчеты показали, что ионы Co в поверхностном слое имеют валентность $1+$ и спин $S=1$, а анализ изображений STM с их помощью позволил выделить не только особенности решетки атомов Co , связанные со структурными дефектами, но также и обнаружить метастабильное состояние Co с валентностью $2+$ и $S=3/2$. Оценки на основе DFT+U расчетов показали, что энергия метастабильного состояния не превышает 130 мэВ/ Co , а значит оно может быть стабилизировано путем подачи соответствующего напряжения на иголку STM. Последующие эксперименты подтвердили возможность изменения зарядового и спинового состояний ионов Co с помощью STM, что открывает путь к записи информации на индивидуальных атомах Co . Важно отметить большое время жизни таких метастабильных состояний — приблизительно 43 минуты.



Атомы Nb — серые, а S — “жемчужного” оттенка. Атомы Co (показаны оранжевым и красным цветами).

Рисунок 2.6 — Иллюстрация изменения зарядового и спинового состояния атомов Co на поверхности $\text{Co}_{1/3}\text{NbS}_2$ с помощью иглы сканирующего туннельного микроскопа

Результаты опубликованы в 2022 году:

Tunable single-atomic charges on a cleaved intercalated transition metal dichalcogenide [Текст] / S. Lim, Sh. Pan, K. Wang, A.V. Ushakov, E.V. Sukhanova, Z.I. Popov, D.G. Kvashnin, S.V. Streltsov, S.-W. Cheong // Nano Letters. — 2022. — V. 22. — P. 1812—1817.

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 Разработана магнетронная технология синтеза магнитных наноструктур с эффектом гигантского магнитосопротивления (ГМС), имеющих рекордные функциональные характеристики. Уникальные свойства полученных наноструктур обусловлены выбором оптимальной композиции и использованием в них оригинальных магнитных и немагнитных сплавов. Разработаны обменно-связанные металлические сверхрешетки CoFeNi/CuIn, которые по величине магнитосопротивления, минимальности гистерезиса и высокой линейности по магнитному полю, превышают зарубежные аналоги и являются лучшими в своем классе магниточувствительных наноматериалов. Сверхрешетки устойчивы к воздействию высоких температур вплоть до $T = 300\text{ }^{\circ}\text{C}$ и могут выступать в качестве исходных магниточувствительных сред для создания магнитных сенсоров. Оптимизированные для конкретных задач наноструктуры, нанесенные на кремниевые пластины, в настоящее время используются на предприятии радиоэлектронной промышленности для создания инновационных изделий магнитоэлектроники и спинтроники.

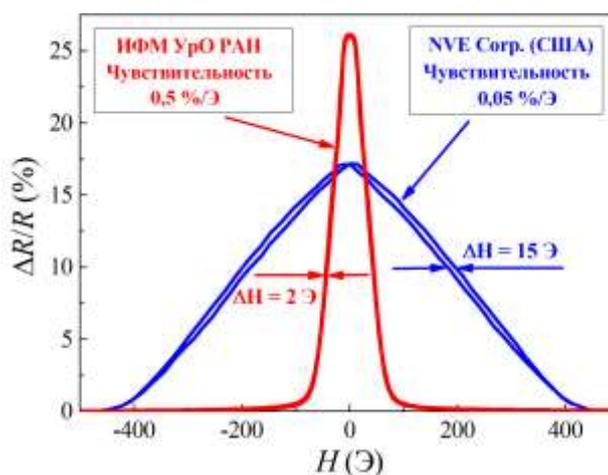


Рисунок 3.1 – Сравнение магниторезистивных кривых для сверхрешетки CoFeNi/CuIn, полученной в ИФМ УрО РАН, и базового ГМС материала, используемого фирмой NVE Corporation (США) для изготовления линейки магниточувствительных сенсоров

Результаты опубликованы в 2022 году:

Advantages of using Cu_{1-x}In_x alloys as spacers in GMR multilayers [Текст] / М.А. Мильяев, Л.И. Наумова, В.В. Проглядо, А.Ю. Павлова, М.В. Макарова, Е.И. Патраков, Н.Р. Глазун, В.В. Устинов // Journal of Alloys and Compounds. — 2022. — V. 917. — P. 165512—165518.

3.2 Дихалькогениды переходных металлов – широкий класс материалов с различными физическими свойствами. Впервые обнаружено, что при замещении по подрешёткам как переходного металла, так и халькогена, в этих материалах формируются наномасштабные неоднородности атомно-кристаллической структуры. При этом материал сохраняет все признаки микроскопически однородного вещества. Выполнено систематическое исследование формирования неоднородностей при неизовалентном замещении по подрешётке переходного металла и при изовалентном замещении по подрешётке халькогена. Изучены кристаллическая и электронная структура. Показано, что такого рода материалы можно рассматривать как твёрдый коллоидный раствор.

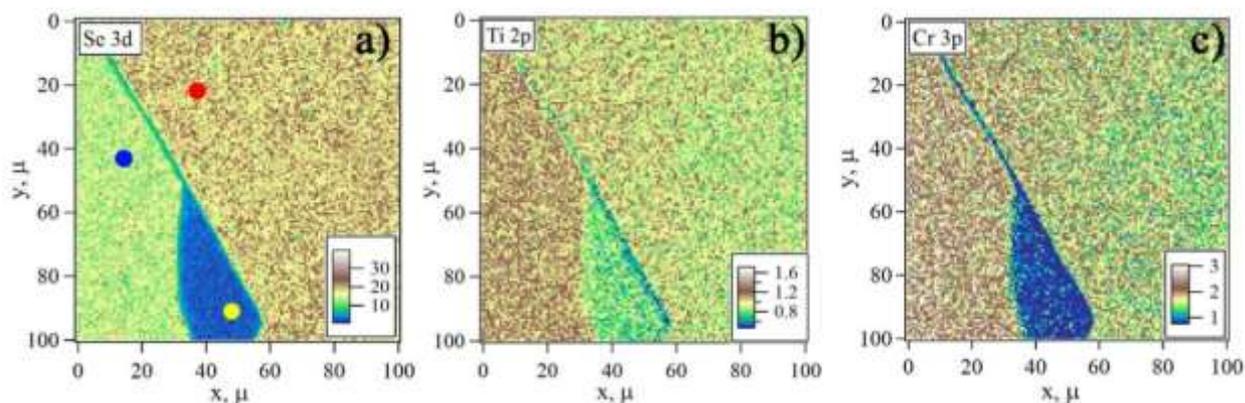


Рисунок 3.2 – SPED-изображения поверхности монокристалла Cr_{0.78}Ti_{0.36}Se₂, полученные в контрасте по Se 3d (a), Ti 2p (b) и Cr 3p (c) основным уровням

Результаты опубликованы в 2022 году:

Electronic Structure of V_xTi_{1-x}Se₂ Solid Solutions with the (V,Ti)Se₂ Structural Fragments [Текст] / A.S. Shkvarin, A.I. Merentsov, M.S. Postnikov, Yu.M. Yarmoshenko, E.G. Shkvarina, E.A. Suslov, A.Yu. Kuznetsova, I. Piš, S. Nappini, F. Bondino, P. Moras, P.M. Sheverdyeva, E. Betz-Guttner, A.N. Titov // Journal of Physical Chemistry C. — 2022. — V. 126. — P. 7076—7085.

Studying the heterogeneity of the Cr_xTi_{1-x}Ch₂ (Ch = S, Se) single crystals using X-ray scanning photoemission microscopy [Текст] / A.I. Merentsov, A.S. Shkvarin, M.S. Postnikov, L. Gregoratti, M. Amati, P. Zeller, P. Moras, A.N. Titov // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 2022. — V. 160. — P. 110309—110315.

3.3 При определении особенностей магнитного упорядочения в металлических наногетероструктурах наиболее информативным методом является рефлектометрия поляризованных нейтронов. Однако, из стандартного эксперимента невозможно получить информацию о фазе коэффициента отражения, что составляет суть фазовой проблемы и препятствует однозначной интерпретации эксперимента. Нами предложена модификация метода опорного слоя для определения фазы коэффициента отражения, отличающаяся тем, что в качестве опорного слоя используется гадолиний. Ядра двух его изотопов (^{155}Gd и ^{157}Gd) взаимодействуют с тепловыми нейтронами резонансным образом, поэтому его длина рассеяния зависит от длины волны нейтронов. Это даёт возможность провести три эксперимента при разных длинах волн и, совместно обработав их, определить модуль и фазу коэффициента отражения нейтронов. Зная эти величины, можно рассчитать потенциал взаимодействия без использования начального приближения. Предложенная модификация не требует приложения магнитных полей и может использоваться в рефлектометрии поляризованных нейтронов. В этом случае необходимо провести три эксперимента для каждого канала рассеяния.

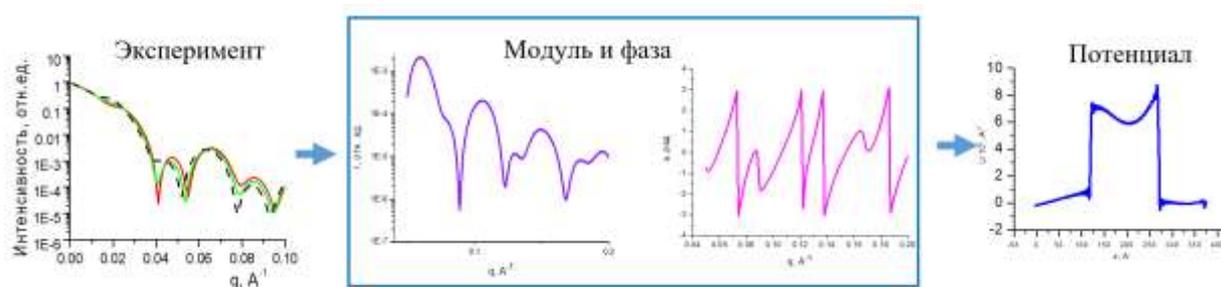
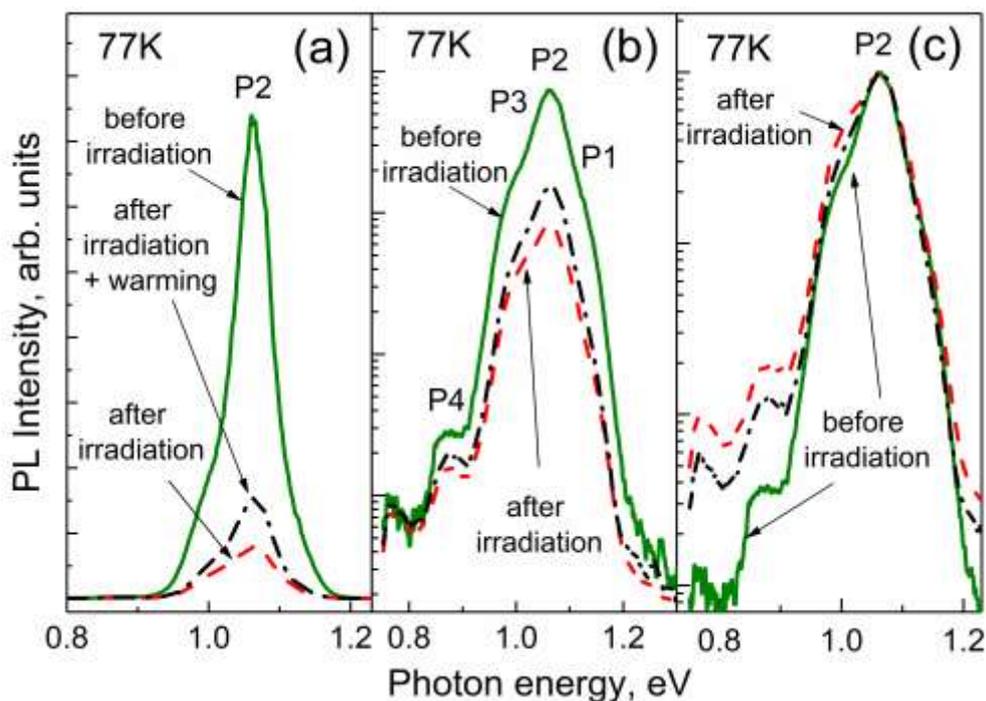


Рисунок 3.3 – Алгоритм эксперимента по резонансной нейтронной рефлектометрии с опорным слоем Gd

Результаты опубликованы в 2022 году:

Gd-Reference-Layer Method in Polarized Neutron Reflectometry [Текст] / E. S. Nikova, Yu. A. Salamatov, E. A. Kravtsov, V. V. Proglyado, V. D. Zhaketov, M. A. Milyaev // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. — 2022. — V. 16. — P. 939—942.

3.4 Исследован эффект облучения тонких плёнок $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$, на подложках $\text{Mo}/\text{стекло}$, электронами с энергией 10 МэВ при температуре 77 К. Плёнки исследовались методом фотолюминесценции (ФЛ) при температуре 77 К до и после облучения без нагрева образцов, а также после нагрева до 300 К. В спектрах ФЛ обнаружены три перекрывающиеся полосы P1, P2 и P3, обусловленные межзонной рекомбинацией свободных электронов со свободными дырками (P1) и свободных электронов с дырками, захваченными на акцепторные уровни, уширенные из-за образования «хвостов» акцепторных состояний вблизи валентной зоны (P2, P3). Установлено, что облучение электронами уменьшает интенсивность полос, перераспределяет каналы излучательной рекомбинации из-за формирования глубоких ловушек и уменьшает степень компенсации твердых растворов. На рисунке 3.4 представлены спектры ФЛ тонких плёнок $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$, измеренные при температуре жидкого азота до и после облучения электронами.



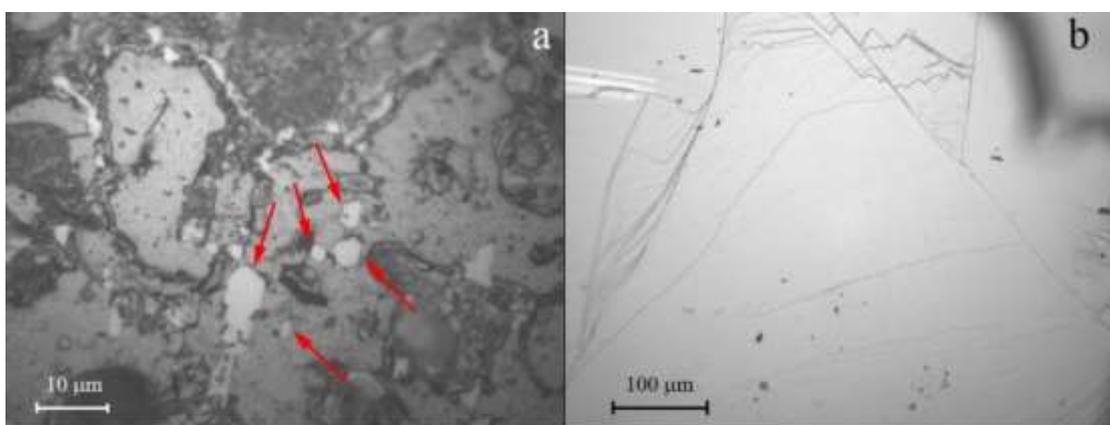
Спектры записаны при температуре жидкого азота до и после облучения, а также после нагрева до комнатной температуры в линейном (a) и логарифмическом (b) масштабе; нормированный спектр ФЛ, измеренный при плотности мощности возбуждения 20 Вт/см² (c)

Рисунок 3.4 – Спектры фотолюминесценции тонких плёнок $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$

Результаты опубликованы в 2022 году:

Irradiation of $\text{Cu}(\text{In, Ga})\text{Se}_2$ Thin Films by 10 MeV Electrons at 77 K: Effect on Photoluminescence Spectra [Текст] / М.А. Sulimov, М.Н. Sarychev, I.A. Mogilnikov, V.Yu. Ivanov, V.A. Volkov, V.D. Zhivulko, A.V. Mudryi, M.V. Yakushev // Физика и техника полупроводников. — 2022. — V. 56. — P. 546—546.

3.5 Интеркаляция слоистых дихалькогенидов переходных металлов более, чем одним металлом позволяет расширить диапазон изменяемых интеркаляцией свойств. Если в моно-интеркалатных соединениях единственным варьируемым параметром оказывается концентрация интеркаланта, то уже в би-интеркалатных соединениях возникает возможность как варьирования каждого из интеркалантов, так и соотношения между ними. Напрашивается аналогия между монокромным рисунком и красочной картиной, где сочетание красок способно порождать эффекты, не сводимые к аддитивным. При этом принципы взаимного влияния интеркалантов на характер их химической связи с решёткой остаются во многом не понятными. В настоящей работе мы изучали взаимодействие $\text{Fe}_{0.25}\text{TiSe}_2$ и $\text{Ni}_{0.25}\text{TiSe}_2$ в процессе выращивания монокристаллов $\text{Fe}_x\text{Ni}_y\text{TiSe}_2$ методом газотранспортных реакций. Подробно изучена морфология и состав поверхности полученных монокристаллов. Обнаружены включения $(\text{Fe,Ni})_4\text{Se}_5$ и Ti_3Se_4 , заселяющих поверхность монокристалла составом $(\text{Fe,Ni})_{0.25}\text{TiSe}_2$ и находящихся в когерентной связи с материнским кристаллом. Предложен механизм формирования таких композитных кристаллов.



Красными стрелками указаны включения гексагональной формы.

(а) поверхность после выращивания; (б) поверхность после скола

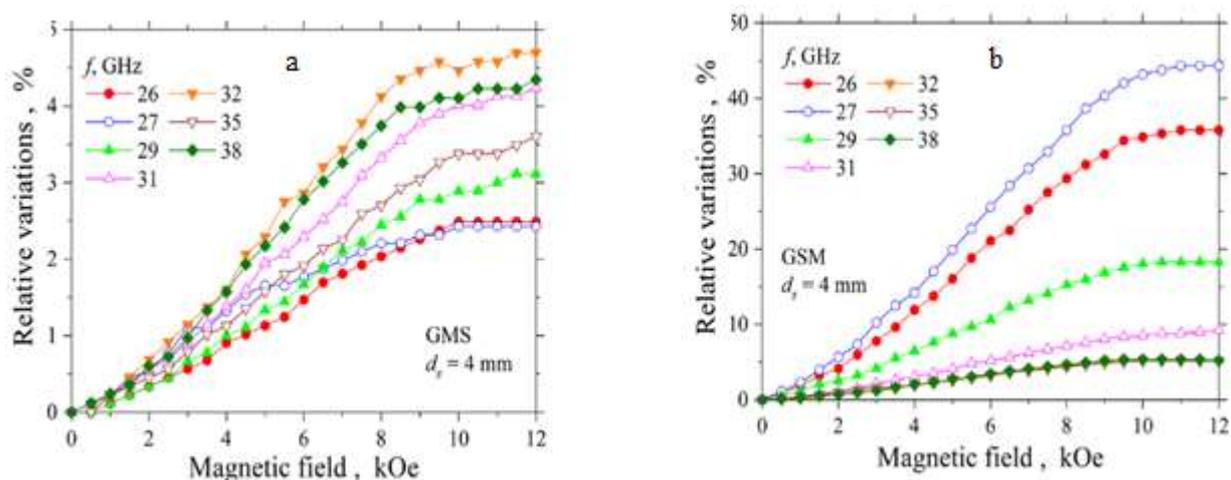
Рисунок 3.5 – Изображение монокристалла $(\text{Fe,Ni})_x\text{TiSe}_2$, полученное с помощью оптического микроскопа

Результаты опубликованы в 2022 году:

Morphology and composition of nanoinclusions in $(\text{Fe, Ni})_{0.25}\text{TiSe}_2$ [Текст] / A.S. Shkvarin, A.I. Merentsov, M.S. Postnikov, E.I. Patrakov, E. Betz-Guttner, L. Gregoratti, M. Amati, P. Zeller, A.N. Titov // Materials Science and Engineering B. — 2022. — V. 283. — P. 115821—115829.

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

4.1 С использованием экспериментальных методов электродинамики пространственно-ограниченных структур получены частотные и полевые зависимости коэффициентов отражения и прохождения в системе плоскопараллельных слоев типа металлическая сверхрешетка – диэлектрическая подложка. Установлено, что для сверхрешеток состава (CoFe)/Cu наблюдается невзаимность следующего вида. Микроволновой гигантский магниторезистивный эффект (μ GMR) при отражении волн значительно увеличивается, если волна падает сначала на диэлектрическую подложку, по сравнению со случаем падения волны непосредственно на металлическую сверхрешетку. Анализ теоретической модели волновых процессов в рассматриваемой системе позволяет сделать вывод о том, что увеличение эффекта μ GMR обусловлено выполнением условия четвертьволнового резонанса для немагнитной подложки. Показано также, что невзаимность не наблюдается при прохождении волн через рассматриваемую систему слоев. Усиление микроволнового гигантского магниторезистивного эффекта при отражении может быть использовано в сенсорах и высокочастотных устройствах.



Толщина диэлектрической подложки – 4 мм.

Рисунок 4.1 – Относительные изменения коэффициентов отражения в зависимости от поля намагничивания для электромагнитных волн различных частот при падении волны на подложку (а) и сверхрешетку (б)

Результаты опубликованы в 2022 году:

Enhancement of microwave giant magnetoresistance effect in reflected wave [Текст] / А.В. Rinkevich, D.V. Perov, E.A. Kuznetsov, O.V. Nemytova, M.A. Milyaev, V.V. Ustinov // Applied Physics Letters. — 2022. — V. 120. — P. 233502—233508.

Гигантский эффект невзаимности для микроволнового магнитосопротивления сверхрешеток (CoFe)/Cu [Текст] / В. В. Устинов, А. Б. Ринкевич, М. А. Миляев, Е. А. Кузнецов, Д. В. Перов // Доклады российской академии наук. Физика, технические науки. — 2022. — V. 506. — P. 52—55.

Невзаимность в распространении микроволн в системе [(CoFe)/Cu]/(glass) [Текст] / А. Б. Ринкевич, Д. В. Перов, М. А. Миляев, Е. А. Кузнецов // Журнал технической физики. — 2022. — V. 92. — P. 1919—1929.

4.2 Получены и исследованы CrAlSiC покрытия, осажденные в различных условиях генерации углеродной плазмы: распыление графита (CrAlSiC(I)) или деструкция ацетилена (CrAlSiC(II)). Для генерации ионов Cr, Al и Si использован катодно-дуговой источник с CrAlSi катодом. Независимо от способа генерации плазмы в покрытиях формируется непрерывный углеродный кластер (матрица) и образуется химическая связь между кремнием и алюминием. Аморфная матрица CrAlSiC(I) содержит включения SiC (10-30) нм и пронизана сетью дендритоподобных структур алюминия. Структура CrAlSiC(II) однородна, не содержит дендритоподобных образований, а включения имеют размер (7-8) нм. Структурные особенности влияют на свойства покрытий. Механическое несоответствие и слабая связь между дендритами и матрицей в CrAlSiC(I) приводят к образованию трещин и микроканалов, снижающих коррозионную стойкость. В то же время, нанокристаллы карбида кремния снижают коэффициент трения (0,05) и повышают износостойкость. Однородная структура и наличие оксидных пленок обеспечивают высокую коррозионную стойкость CrAlSiC(II). По механическим характеристикам это покрытие уступает CrAlSiC(I).

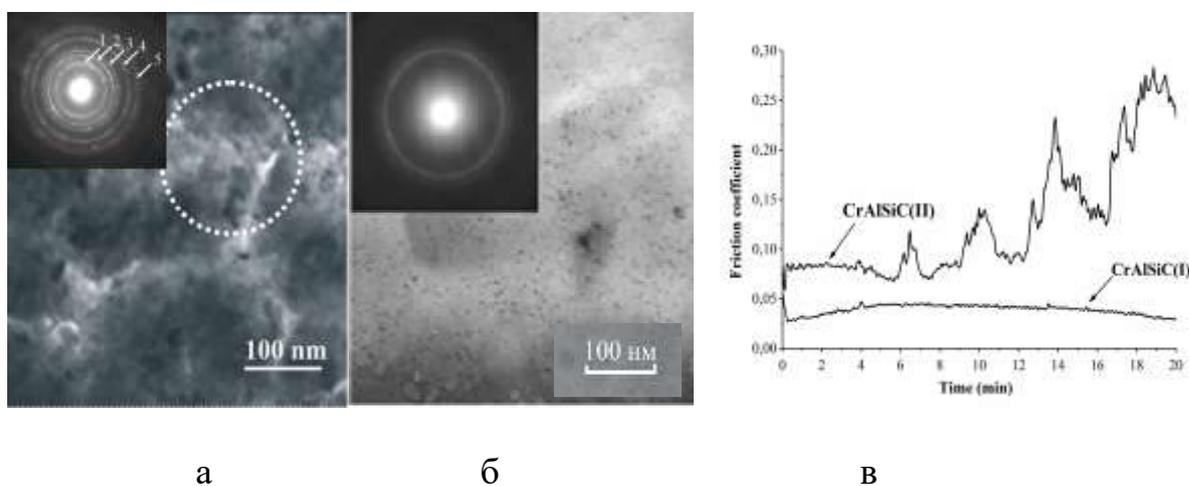


Рисунок 4.2 – Структура CrAlSiC(I) (а) и CrAlSiC(II) (б) (электронная микроскопия) и зависимости коэффициента сухого трения от времени пары покрытие - стальной шарик (Ø 6 мм, нагрузка 3 Н) (в)

Результаты опубликованы в 2022 году:

Structure and corrosion behaviours of $\text{Cr}_x\text{Al}(\text{Si})_y\text{C}$ coatings fabricated by vacuum arc discharge technique. [Текст] / А.Р. Rubshtein, А.В. Vladimirov, S.A. Plotnikov, V.B. Vykhodets, Т.Е. Kurennykh // Letters on Materials. — 2022. — V. 12. — P. 121—125.

4.3 Предложен алгоритм для прогнозирования фазового состава титансодержащих сталей в процессе и после затвердевания. Метод моделирования основан на термодинамических расчётах и предусматривает сценарии кристаллизации через образование феррита, аустенита, а также протекание перитектической реакции. В алгоритме учитывается возможность выделения в процессе кристаллизации из жидкой фазы TiN, TiS, MnS и $TiC_{0.5}S_{0.5}$. В программной реализации алгоритма заложено два варианта поведения феррита при кристаллизации: с “замороженной” и быстрой диффузией элементов в металлической подрешётке данной фазы. На рисунке 4.3 в качестве примера показаны зависимости изменения долей фаз от температуры для сплава с 0.25 C; 0.009 N; 0.04 Si; 0.01 S; 0.05 Ti; 0.015 Cr; 1.5 Mn (всё в масс. %).

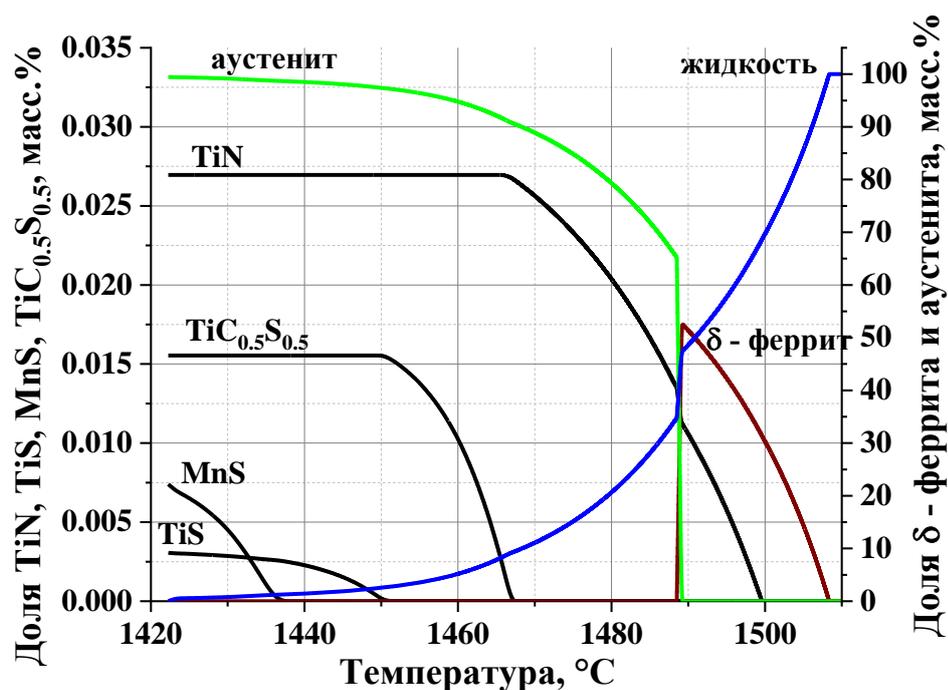
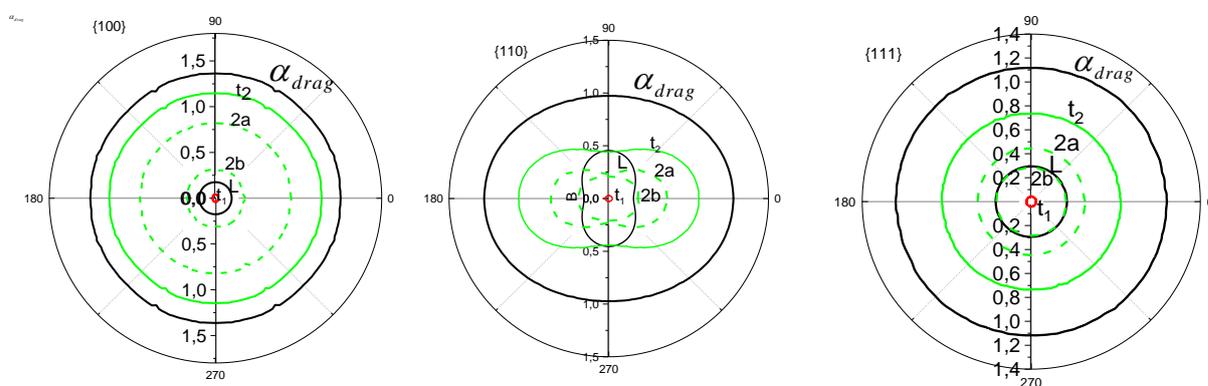


Рисунок 4.3 – Результаты моделирования кристаллизации стали

Результаты опубликованы в 2022 году:

Gorbachev, I.I. Simulation of the crystallization process in low-carbon low-alloy steels [Текст] / I.I. Gorbachev, E.I. Korzunova, V.V. Popov // Physics of Metals and Metallography. — 2022. — V. 123. — P. 592—597.

4.4 Исследовано влияние анизотропии упругой энергии на зависимости термоэдс увлечения в нанопленках калия от ориентации плоскостей пленок, направлений теплового потока и геометрических параметров. Показано, что термоэдс увлечения в квадратных нанопленках калия с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ являются изотропными в плоскости пленки. Их анизотропия определяется ориентацией плоскости. Для ориентации пленок $\{110\}$ зависимости термоэдс увлечения принимают эллипсоидальный вид. При увеличении толщины пленок с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ анизотропия термоэдс увлечения изменяется немонотонным образом. Это обусловлено конкуренцией вкладов медленных квазипоперечных и продольных фононов, скорость релаксации на электронах для которых оказывается в 30 раз больше. Показано, что термоэдс увлечения в пленках калия с длинами, гораздо большими их ширины в режиме граничного рассеяния, становятся анизотропными. Однако учет электрон-фононной релаксации приводит к изотропизации в нанопленках с ориентациями $\{100\}$ и $\{111\}$ в плоскости пленки. При этом ориентационная анизотропия сохраняется. Для длинных пленок с ориентацией $\{110\}$ эти зависимости остаются эллипсоидальными.



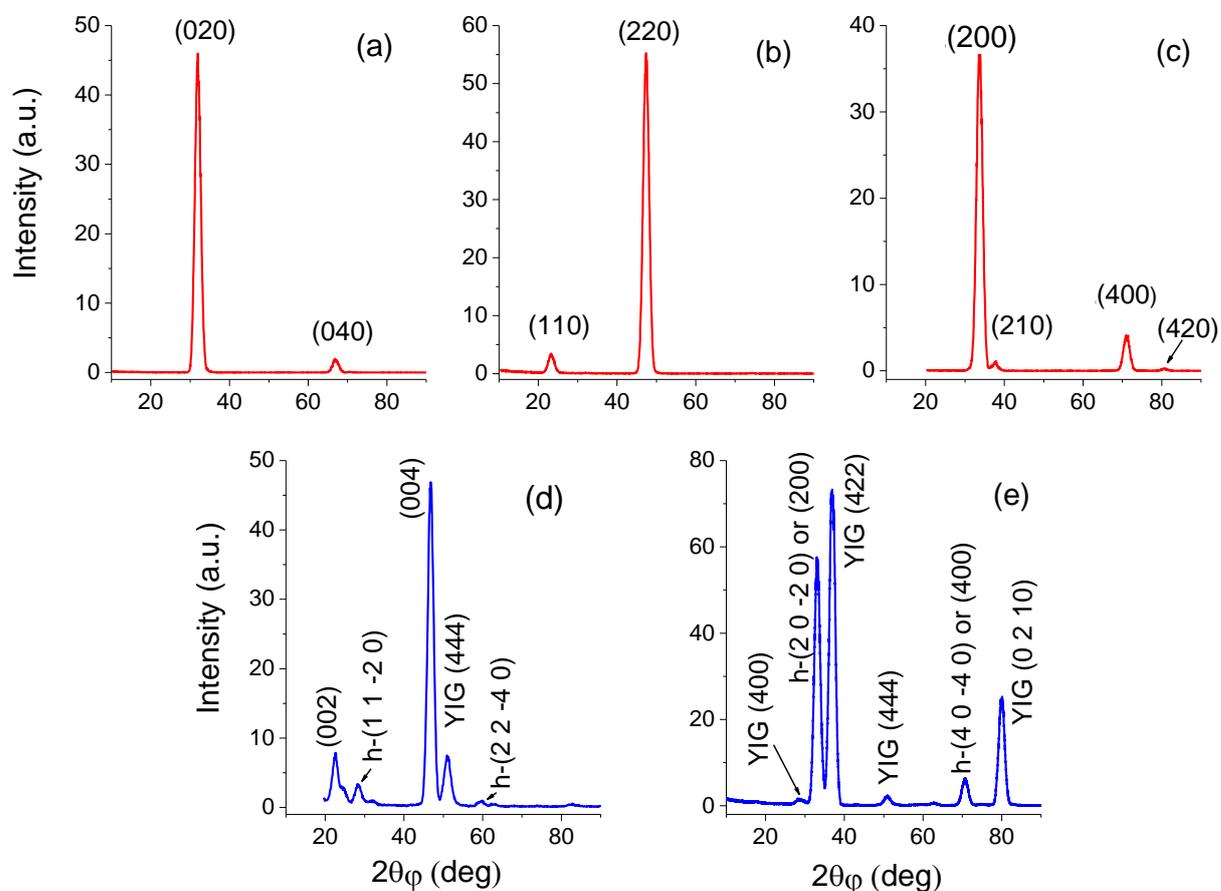
Кривые 2a и 2b вклады продольной и сдвиговой компоненты моды t_2

Рисунок 4.4 – Угловые зависимости термоэдс увлечения для квадратных пленок калия с параметрами $L = W = 100D$ и $D = 50$ нм и ориентациями плоскостей $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$

Результаты опубликованы в 2022 году:

Kuleyev, I.I. Phonon focusing and anisotropy of drag thermopower in potassium nanofilms at low temperatures [Текст] / I.I. Kuleyev, I.G. Kuleyev // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 2022. — V. 170. — P. 110948—110957.

4.5 Методами мёссбауэровской спектроскопии и рефлектометрии с синхротронным возбуждением, а также рентгеноструктурным анализом при возбуждении скользящим пучком (GI-XRD) исследованы магнитная и кристаллографическая структура сверхтонких (с толщиной $4\div 40$ нм) пленок антиферромагнитного ортоферрита иттрия YFeO_3 , на монокристаллических подложках из $r\text{-Al}_2\text{O}_3$, полученных магнетронным распылением. Эксперименты выполнены на образцах, обогащенных изотопом ^{57}Fe . Прослежена эволюция структурных и магнитных свойств пленок с толщиной. Для толщин менее 15 нм пленка кристаллографическая ось c ориентирована в плоскости пленок, в то время как для больших толщин ось c ориентирована нормально к плоскости пленок. Соответственно, для толщин пленок менее 15 нм АФМ ось ориентирована по нормали к плоскости пленок. Для больших толщин АФМ ось ориентирована в плоскости пленок. Обнаруженные особенности изменений свойств сверхтонких пленок YFeO_3 важны для понимания механизмов формирования основного магнитного состояния в низкоразмерных антиферромагнетиках и их применений в антиферромагнитной спинтронике и магنونике.



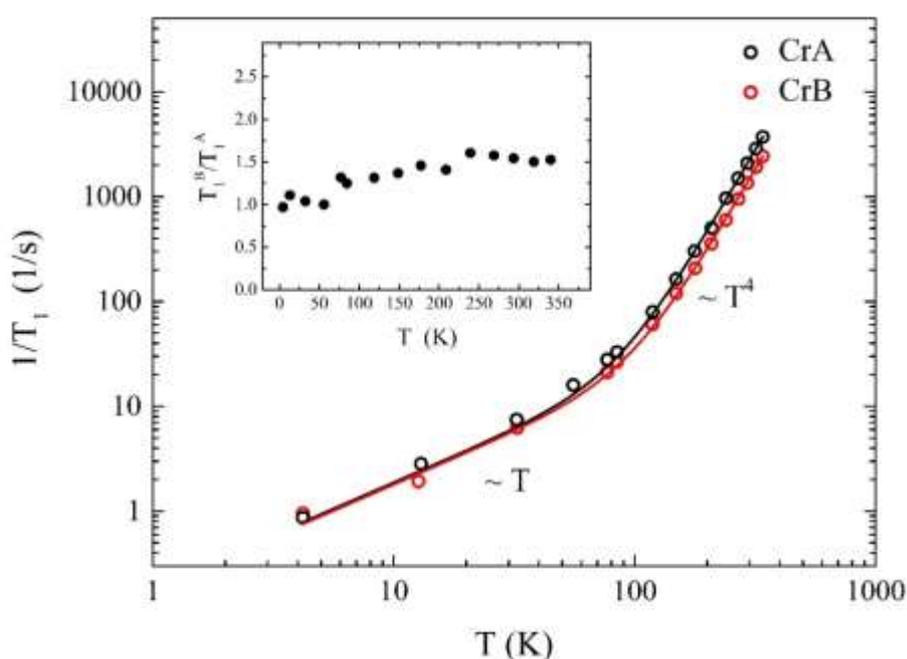
Выбранные азимутальные ориентации векторов рассеяния для (a–c): $(0\ k\ 0)$ (a), $(h\ k\ 0)$ (b) и $(h\ 0\ 0)$ (c). Выбор азимутальных ориентаций для (d, e) определялся подгонкой рефлексов $(0\ 0\ 1)$ (d) и $(h\ 0\ 0)$ (e) от орторомбической фазы YFeO_3 .

Рисунок 4.5 – GI-XRD спектры пленки YFeO_3 толщиной 40 нм (a–c) и пленки YFeO_3 толщиной 4 нм (d, e)

Результаты опубликованы в 2022 году:

Mössbauer Synchrotron and X-ray Studies of Ultrathin YFeO_3 Films. [Текст] / Andreeva M., Baulin R., Nosov A., Gribov I., Izyurov V., Kondratev O., Subbotin I., Pashaev E. // Magnetism. — 2022. — V. 2. — P. 328—339.

4.6 Исследованы статические и динамические свойства полуметаллического ферромагнетика CrO_2 методами ядерного магнитного резонанса с использованием ядер-зондов ^{53}Cr . В ферромагнитной фазе в спектре ЯМР обнаружены две линии (CrA и CrB), несмотря на то что все ионы хрома занимают кристаллографически эквивалентные позиции. Получены температурные зависимости скорости спин-решеточной релаксации $(T_1)^{-1}$ в диапазоне $T = (4.2 - 360.0)$ К. Выяснено, что в области низких температур ($T \leq 60$ К) релаксация ядерных магнитных моментов определяется, главным образом, пропорциональным температуре орбитальным вкладом, обусловленным флуктуациями орбитальных токов d -электронов. Показано, что при $T > 60$ К основным механизмом, приводящим к релаксации, является трех-магнонный процесс рассеяния, который сопровождается поглощением одного магнона и образованием двух других. Анализируя T -зависимость $(T_1)^{-1}$ для двух неэквивалентных ионов Cr, установлено, что их валентное состояние одинаково и соответствует валентности «+4», а отличие резонансных частот для ядер этих ионов обусловлено разными магнитными локальными полями в месте их расположения.



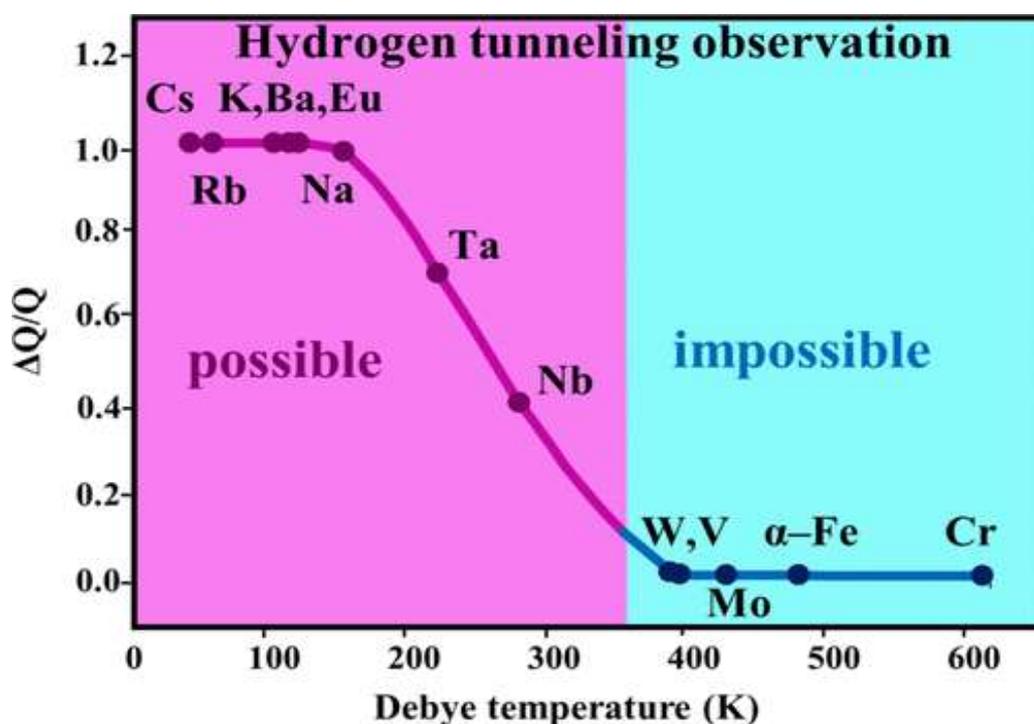
Данные аппроксимированы функцией $1/T_1 = AT + BT^n$. На вставке: температурная зависимость отношения времен релаксации T_1^B/T_1^A .

Рисунок 4.6 – Температурные зависимости скоростей ядерной спин-решеточной релаксации ядер хрома на позициях CrA и CrB

Результаты опубликованы в 2022 году:

Valence state of chromium ions in the half-metallic ferromagnet CrO_2 probed by ^{53}Cr NMR [Текст] / Y. V. Piskunov, A. F. Sadykov, V. V. Ogloblichev, A. G. Smolnikov, A. P. Gerashenko, P. Z. Si // Physical Review B. — 2022. — V. 106. — P. 94428—94435.

4.7 Определены условия, которые необходимы для наблюдения квантовой диффузии водорода в металлах. Постановка задачи обусловлена парадоксальной ситуацией, сложившейся в разделе «диффузия в твердых телах». В нем туннелирование, наряду с надбарьерными прыжками, является одним из двух механизмов миграции атомов, и в то же время опытные данные по квантовой диффузии водорода известны только для протия в Nb и Ta и дейтерия в Na. Выполнено исследование температурной зависимости классической и квантовой диффузии дейтерия в калии. Также установлено, что, основным фактором, определяющим возможность наблюдения квантовой диффузии водорода в металлах, является значение температуры Дебая θ_D матрицы. Туннелирование можно наблюдать только ниже температуры Дебая θ_D матрицы и только в металлах, у которых $\theta_D < 350$ К. Рисунок 4.7 иллюстрирует предсказания работы о возможности регистрации квантовой диффузии водорода в металлах с объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой. Экспериментальные данные по этому вопросу получены для K, Na, Ta, Nb и V.



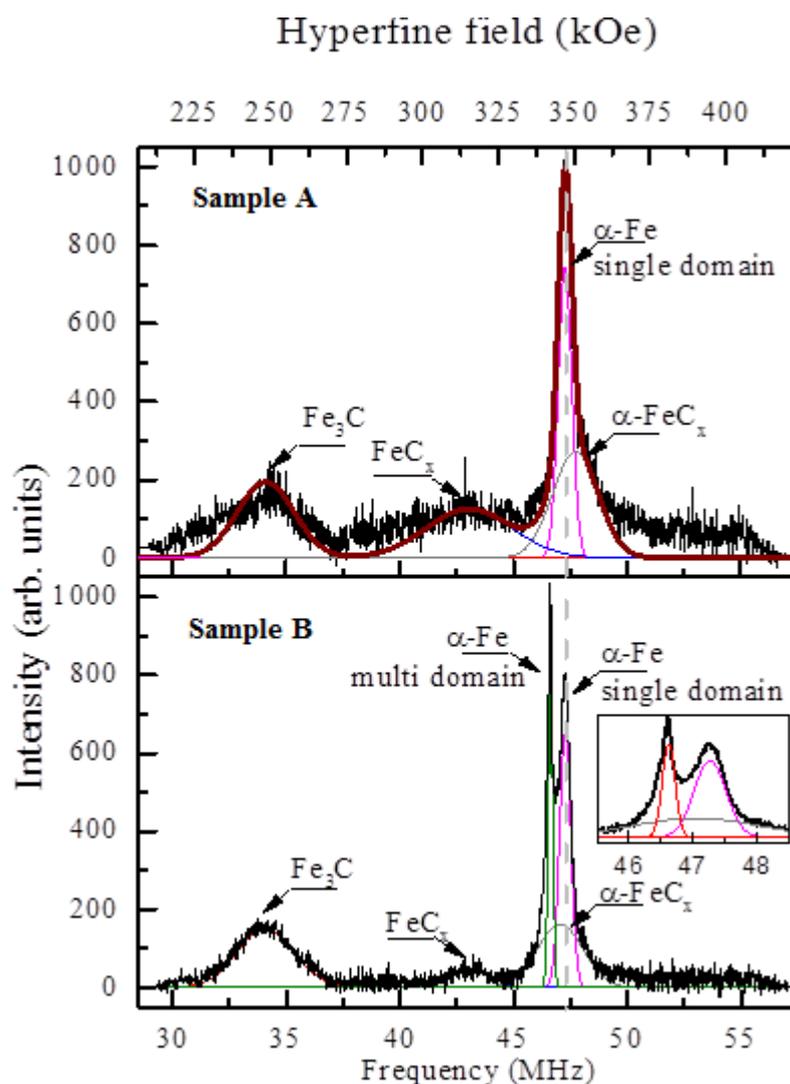
Сиреневым цветом выделены металлы, для которых наблюдение квантовой диффузии возможно, а голубым – невозможно

Рисунок 4.7 – Зависимость от температуры Дебая металла относительного изменения энергии активации диффузии $\frac{\Delta Q}{Q}$ водорода при переходе от механизма надбарьерных прыжков атомов к туннелированию

Результаты опубликованы в 2022 году:

Debye temperature and quantum diffusion of hydrogen in body-centered cubic metals [Текст] / V. Vykhodets, O. Nefedova, T. Kurennykh, S. Obukhov, E. Vykhodets // ACS Omega. — 2022. — V. 7. — P. 8385—8390.

4.8 Методами резонансной спектроскопии исследованы наночастицы на основе Fe, Co, Ni, синтезированные газофазным способом. Впервые показано, что подобными локальными методами можно определить фазовый состав наночастиц с размером меньше 15 нм. Был обнаружен размерный эффект, заключающийся в изменении распределения наведенных магнитных полей, когда размер наночастиц уменьшается ниже критического размера отдельного домена. Было показано, что этот эффект не зависит от типа оболочки и не связан с дефектами поверхности или интерфейса. Для частиц, меньших критического размера, сдвиг сверхтонкого поля обусловлен размагничивающим полем однодоменных частиц. Этот сдвиг уменьшается, когда в более крупных частицах возникает неоднородная или мультидоменная магнитная структура.



Образец А – средний размер наночастиц 14 нм;

образец В - размер наночастиц 36 нм.

Рисунок 4.8 – Характерные спектры ЯМР ^{57}Fe наночастиц в углеродной оболочке Fe@C, полученные в нулевом внешнем магнитном поле при $T = 4.2$ К

Результаты опубликованы в 2022 году:

61Ni NMR study of nickel nanoparticles: Nanoscale effect and magnetic state [Текст] / K. Mikhalev, A. Germov, D. Prokopen, M. Uimin, A. Yermakov, S. Novikov, A. Konev, V. Gaviko, A. Minin // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2022. — V. 563. — P. 169837—169841.

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 С помощью рентгеновской дифракции и рентенофлуоресцентного анализа проведен фазовый и структурный анализ нестехиометрических сплавов TbFe_2Mn_x ($0 \leq x \leq 0.25$). Установлено, что однофазные сплавы формируются вплоть до концентрации Mn $x = 0.25$. Нестехиометрические соединения TbFe_2Mn_x обладают огромным значением спонтанной магнитострикции (до 2550 ppm), что приводит к искажению кубической ($Fd\bar{3}m$) структуры в ромбоэдрическую ($R\bar{3}m$). Допирование марганцем соединения $\text{TbFe}_2\text{Mn}_{0.25}$ приводит к значительному увеличению продольной магнитострикции ($\lambda_{\parallel} \approx 2400$ ppm в магнитном поле 18 kOe) при температуре жидкого азота, что на 25% больше, чем в исходном TbFe_2 . При этом $\text{TbFe}_2\text{Mn}_{0.25}$ сохраняет гигантское значение магнитострикции при комнатной температуре ($\lambda_{\parallel} \approx 1530$ ppm в магнитном поле 18 kOe). Полученные результаты позволяют рассматривать соединения TbFe_2Mn_x в качестве перспективных материалов для магнитострикционных приложений в широком температурном интервале.

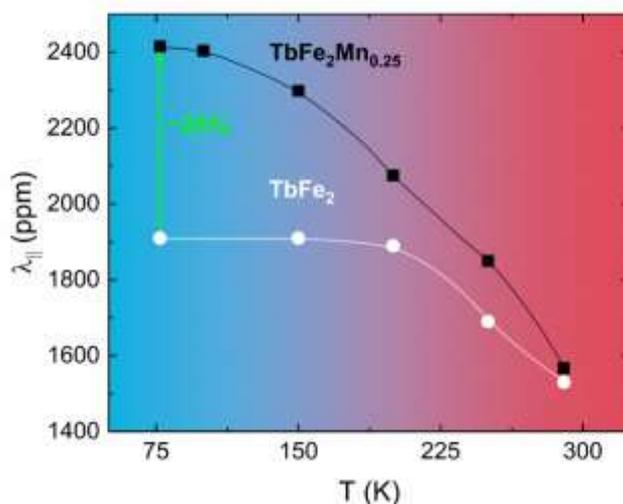


Рисунок 5.1 – Температурная зависимость продольной магнитострикции для TbFe_2 и $\text{TbFe}_2\text{Mn}_{0.25}$

Результаты опубликованы в 2022 году:

Structural and magnetoelastic properties of non-stoichiometric TbFe_2Mn_x Laves phase [Текст] / А.М. Bartashevich, E.G. Gerasimov, N.V. Mushnikov, A.A. Inishev, P.B. Terentev, V.S. Gaviko, D.A. Kolodkin, N.A. Kulesh // Journal of Alloys and Compounds. — 2022. — V. 923. — P. 166360—166369.

5.2 Накопление пластиковых отходов в Мировом океане вызывает растущую общественную озабоченность. Количество микропластика в природных водах в настоящее время неизвестно из-за сложности его количественного определения в воде вследствие низкой концентрации. Нами разработан метод преконцентрации микрочастиц полиэтилена (МРЕ) и полиэтилентерефталата (МРЕТ) с последующим определением их содержания с использованием серийного спектрофотометра и математической обработкой спектров методом частичных наименьших квадратов (PLS). Для концентрирования микрочастиц МРЕ (20-100) мкм и МРЕТ (10-20) мкм в воду добавляли композиционные магнитные наночастицы Fe-C-NH₂ (10 нм), образующие агрегаты с частицами пластика, и отделяли эти гетероагрегаты от воды магнитной сепарацией. Функционализация поверхности наночастиц аминогруппами-NH₂ обеспечивает устойчивое связывание этих частиц с частицами пластика благодаря электростатическому взаимодействию. Установлено, что при 100-кратном концентрировании можно определить концентрации пластика до 20 мкг/л. Использование математической обработки спектров методом PLS позволяет избежать стадию сепарации магнитных наночастиц, что упрощает анализ.

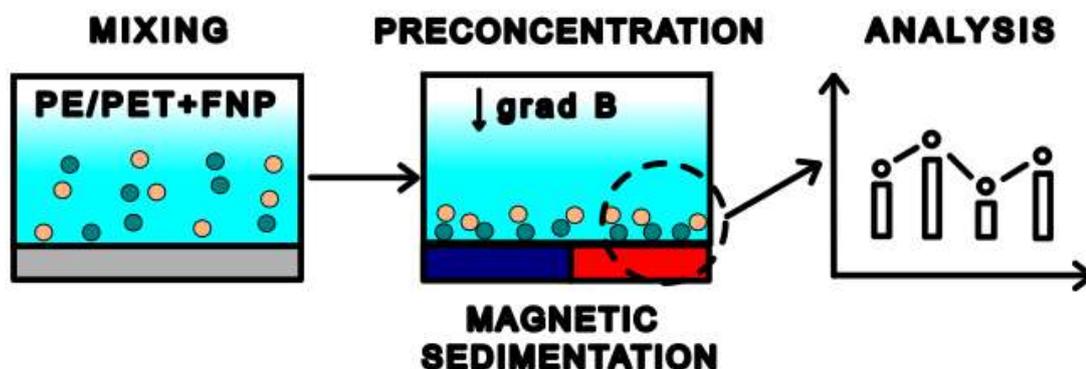


Рисунок 5.2 – Схема определения концентрации МРЕ и МРЕТ в воде с использованием концентрирования методом магнитной седиментации

Результаты опубликованы в 2022 году:

Magnetic nanoparticles for monitoring microplastics pollution in the surface waters [Текст] / I.A. Bakhteeva, I.V. Medvedeva, M.S. Filinkova, I.V. Byzov, M.A. Uimin, E. Tseitlin // Reliability: Theory and Applications. — 2022. — V. 17. — P. 458—463.

5.3 Синтезированы нестехиометрические соединения $\text{Er}_{0.35}\text{Gd}_{0.65}\text{Co}_2\text{Mn}_x$ ($0 \leq x \leq 0.4$) и исследованы их кристаллическая структура, магнитные и магнитотепловые свойства. Обнаружено значительное повышение температуры Кюри соединений от $T_C = 170$ К до $T_C = 324$ К с увеличением содержания Mn. С использованием измерений намагниченности и теплоемкости проведены оценки магнитокалорического эффекта в соединениях при изменении магнитного поля $\Delta H = 20$ кЭ. Обнаружено, что соединения демонстрируют платообразную температурную зависимость изменения магнитной энтропии, индуцированной полем, ΔS_m в широком температурном диапазоне от 50 до 350 К и высокие значения относительной холодопроизводительности (до 220 Дж/кг). Это дает возможность использовать соединения $\text{Er}_{0.35}\text{Gd}_{0.65}\text{Co}_2\text{Mn}_x$ для непрерывного магнитного охлаждения, начиная с комнатной температуры и до 50 К, поскольку они сохраняют неизменными свои ΔS_m и ΔT в этом диапазоне температур.

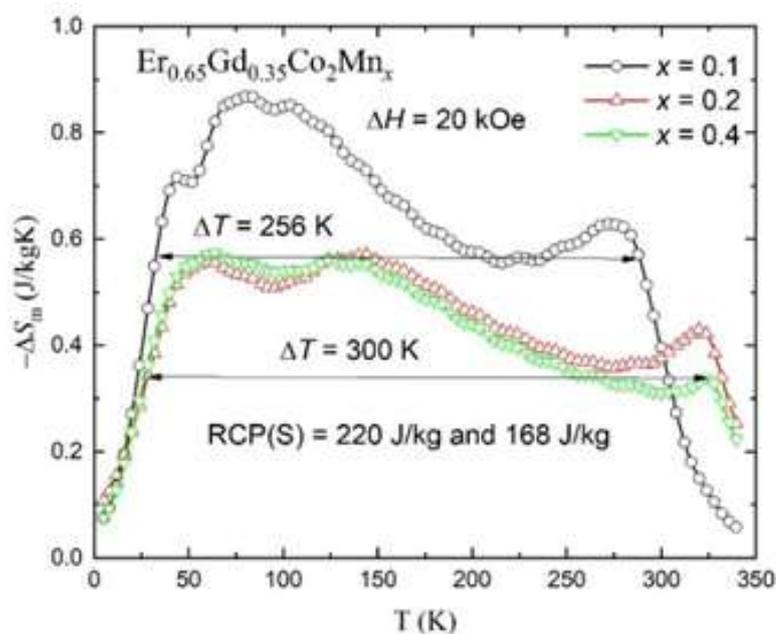


Рисунок 5.3 – Температурные зависимости изменения магнитной энтропии ΔS_m при изменении напряженности магнитного поля $\Delta H = 20$ кЭ нестехиометрических соединений $\text{Er}_{0.35}\text{Gd}_{0.65}\text{Co}_2\text{Mn}_x$

Результаты опубликованы в 2022 году:

Magnetocaloric effect, heat capacity and exchange interactions in nonstoichiometric $\text{Er}_{0.65}\text{Gd}_{0.35}\text{Co}_2\text{Mn}_x$ compounds [Текст] / E.G. Gerasimov, A.A. Inishev, N.V. Mushnikov, P.B. Terentev, V.S. Gaviko, M.S. Anikin // *Intermetallics*. – 2022. – V. 140. – P. 107386–107392.

5.4 Известно, что замещение железа кремнием в системе $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x)_2$ при $x > 0.05$ приводит к переходу ферромагнетик – антиферромагнетик, сопровождаемому ромбоэдрическими искажениями исходной кубической структуры. С целью установления причин этого магнитоструктурного перехода нами проведены измерения магнитных свойств и эффекта Мёссбауэра $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x)_2$ с $x \leq 0.05$. Показано, что температура Кюри монотонно убывает с ростом содержания Si. Мёссбауэровские спектры измерены в парамагнитном состоянии с использованием спектрометров с высоким уровнем дискретизации шкалы скоростей доплеровской модуляции – 4096 каналов и с обычным разрешением по скорости – 512 каналов. Сравнение результатов обработки спектров с результатами математического моделирования различных вариантов распределения атомов Si в структуре позволило доказать локальное упорядочение атомов Si в подрешетке Fe, которое является причиной локальных искажений кристаллической решетки. Эти искажения вероятно и вызывают магнитоструктурный переход в соединениях $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x)_2$, наблюдающийся при низких температурах.

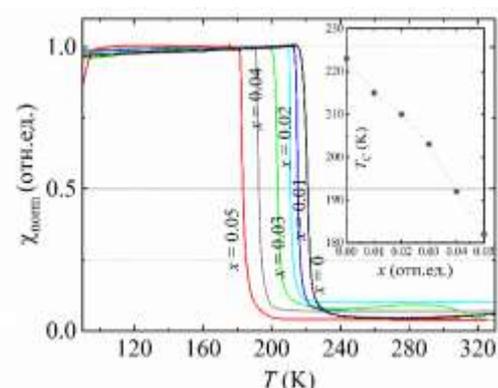


Рисунок 5.4 – Температурные зависимости магнитной восприимчивости для $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x)_2$ ($x \leq 0.05$) и рассчитанные температуры Кюри (на вставке)

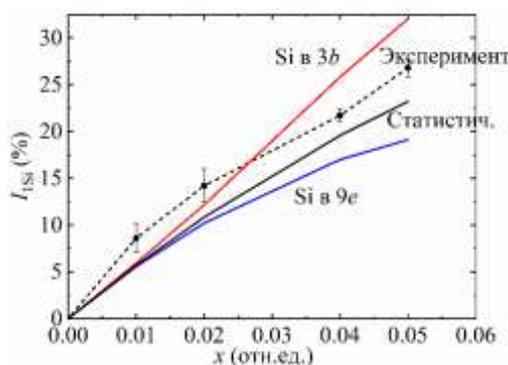


Рисунок 5.5 – Сравнение данных мёссбауэровских измерений с результатами математического моделирования различных вариантов распределения атомов Si в подрешетке Fe

Результаты опубликованы в 2022 году:

On the nature of the magnetostructural phase transition in $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x)_2$ [Текст] / S.P. Naumov, N.V. Mushnikov, P.B. Terentev, M.I. Oshtrakh, N.M. Kleinerman // Journal of Alloys and Compounds. — 2022. — V. 893. — P. 162198—162204.

Magnetic Properties and Local Atomic Ordering in $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x)_2$ Compounds with a Silicon Content $x \leq 0.05$ [Текст] / S. P. Naumov, N. V. Mushnikov, P. B. Terentev, N. M. Kleinerman // Physics of Metals and Metallography. — 2022. — V. 123. — P. 552—558.

5.5 Созданы аморфные ленты $\text{Fe}_3\text{Co}_{67}\text{Cr}_3\text{Si}_{15}\text{B}_{12}$ с продольной (LA) и поперечной (ТА) одноосной магнитной анизотропией и исследованы их магнитные свойства. Проведен сравнительный анализ магнитоимпедансных (МИ) характеристик двухслойных композитов, состоящих из пары лент с поперечной анизотропией или пары лент с разным типом анизотропии. Разница менее 5% наблюдалась для двухслойного композита с поперечной анизотропией. Ключевые особенности обоих типов анизотропии присутствовали для композита с разными типами: i) двухпиковая полевая зависимость МИ полного отношения импедансов, которая ниже, чем для ленты с поперечной анизотропией за счет индуктивного вклада; ii) «провал» в нулевом поле вследствие поверхностной анизотропии, которая характеризует ленты с продольной анизотропией.

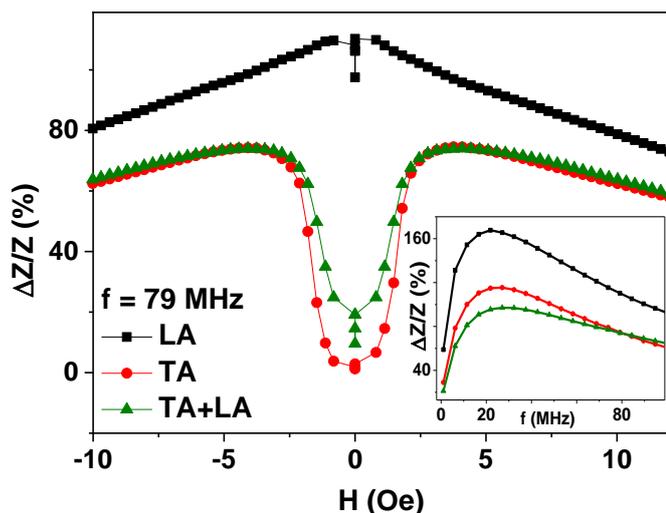


Рисунок 5.6 – Полевая зависимость и частотная зависимость (на вставке) ГМИ отношения полного импеданса для ленты ТА, индивидуальной ленты LA и двухслойного композита на основе лент ТА и LA

Результаты опубликованы в 2022 году:

Design of composite materials based on amorphous ribbons with tailored anisotropy [Текст] / А. А. Pasyukova, А. V. Timofeeva, V. A. Lukshina, E. A. Stepanova // AIP Conference Proceedings. — 2022. — V. 2466. — P. 30037—30043.

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 Впервые разработан и экспериментально доказан физический принцип создания мелко-(МЗ) и ультрамелкозернистых (УМЗ) стареющих многокомпонентных промышленных сплавов на основе системы Al-Li последних поколений (марок 1441, 1450, 1461, 1469, широко применяемых в современной российской авиакосмической и ракетной технике). При этом когерентные нанодисперсоиды β' -L1₂ (типа Al₃Zr, Al₃Sc, Al₃(Sc, Zr)) не только обеспечивают измельчение зеренной структуры, но и при термической обработке исключают появление приграничных зон свободных от выделений. При последующей термомеханической обработке в сплавах формируется УМЗ-структура с внутрзерненным распределением стабильных нанофаз Т-типа на основе Al-Li-Cu, S-типа на основе Al-Li-Mg, θ и Ω -типа на основе Al-Cu. Как следствие, наличие однородного распределения данных неизоморфных α -матрице нанофаз приводит к смене механизма пластической деформации от перерезания частиц когерентных выделений к их огибанию дислокациями и определяет как повышение прочности, так и сохранение пластичности. Аналогичные эффекты в приповерхностном слое обеспечиваются в результате облучения высокоэнергетическими ионами Ar⁺.

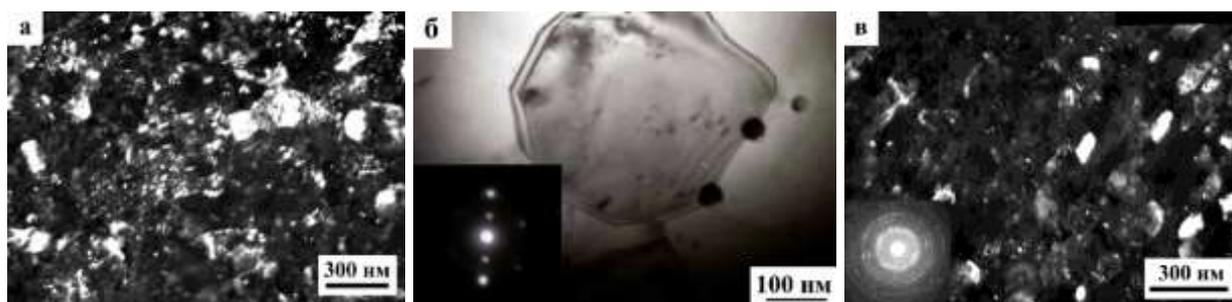
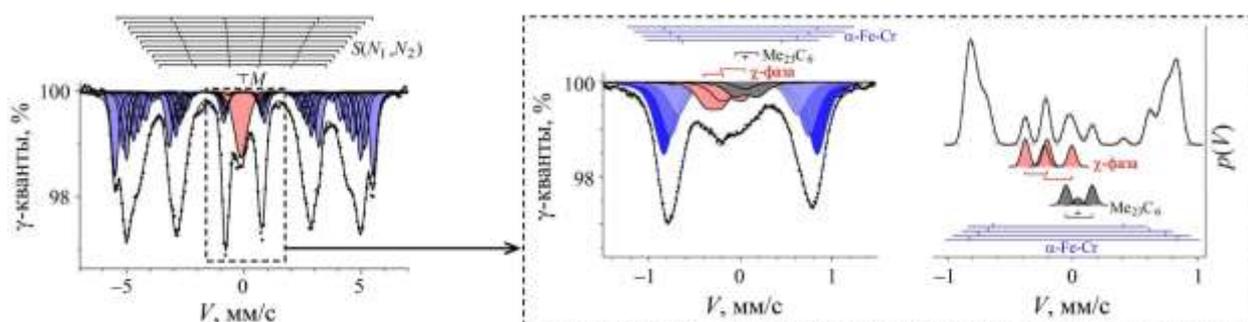


Рисунок 6.1 – Изображения ультрамелкозернистой структуры в сплавах 1469 (а), 1441 (б) и 1461 (в) 1441 после КВД и отжига при $T = 150\text{ }^{\circ}\text{C}$, 15 часов

Результаты опубликованы в 2022 году:

Multicomponent Aging Al-Li-Based Alloys of the Latest Generation: Structural and Phase Transformations, Treatments, Properties, and Future Prospects [Текст] / D. Y. Rasposienko, L. I. Kaigorodova, V. G. Pushin, Y. M. Ustugov // Materials. — 2022. — V. 15. — P. 4190—4232.

6.2 Методами мессбауэровской спектроскопии и трансмиссионной электронной микроскопии выполнено исследование радиационно-индуцированных в реакторе на быстрых нейтронах БН-600 с дозовой нагрузкой до 85 сна в интервале температур (500-660) °С структурно-фазовых переходов в радиационно-стойких сталях ЭП823 и ЭП823-ДУО. Мессбауэровские исследования образцов с высокой наведенной активностью после высокодозного облучения нейтронами выполнены впервые. В ферритно-мартенситной стали после облучения с дозами выше 50 сна происходит распад твердого раствора с ОЦК структурой и выходом элементов легирования – хрома, молибдена и углерода из металлической матрицы с образованием интерметаллидной χ -фазы, а также карбидов типа $Me_{23}C_6$. Установлено, что механические напряжения приводят к ускорению процессов распада структуры сталей. Показано, что основным фактором ускорения распада структуры при облучении нейтронами является анизотропия напряжений между направлениями вдоль и поперек поверхности твельной трубки.



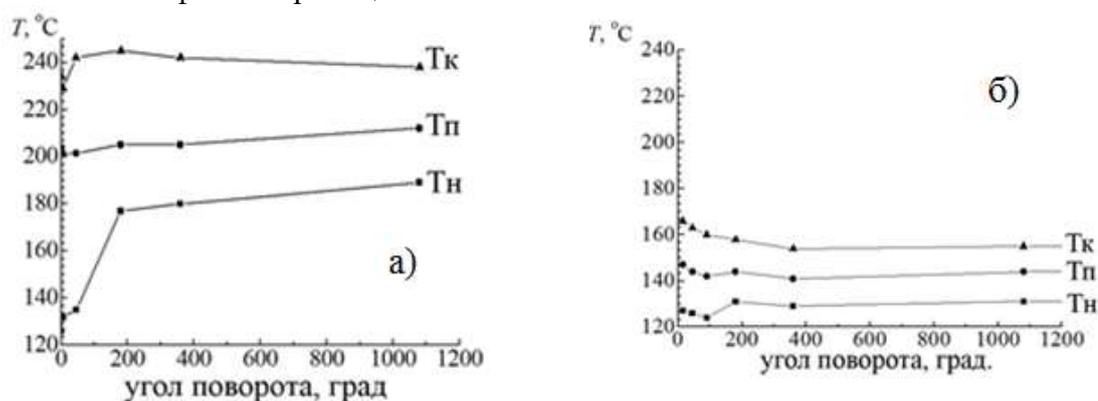
На рисунке указаны неэквивалентные секстеты $S(N_1, N_2)$ и центральный синглет M , а также моделирование и расчет центральной части мессбауэровского спектра

Рисунок 6.2 – Мессбауэровские спектры и распределение $p(V)$ центральной части спектров стали ЭП823 после облучения нейтронами с дозой D 75 сна при температуре T 600 °С. Значения дозы и температуры указаны приблизительно

Результаты опубликованы в 2022 году:

Mössbauer spectroscopy investigation of the effect of a high-dose neutron irradiation on the atomic redistribution in the industrial steel EP823 [Текст] / Kozlov K., Shabashov V., Kozlov A., Sagaradze V., Semyonkin V., Panchenko V., Zamatovskii A., Kataeva N., Nikitina A. // Journal of Nuclear Materials. — 2022. — V. 558. — P. 153384—153393.

6.3 С использованием методов дифференциальной сканирующей калориметрии, просвечивающей электронной микроскопии проведены исследования обратного $\omega \rightarrow \alpha$ -фазового перехода в титане и цирконии, продеформированных в камере Бриджмена при близких условиях нагружения, с целью получения сведений о степени стабильности исследуемых металлов. Было впервые показано, что, несмотря на качественное сходство протекания процессов тепловыделения в исследуемых металлах, регистрируемых методом дифференциальной сканирующей калориметрии, обратное фазовое превращение в титане, в отличие от циркония, реализуется при более низких температурах и в более узком температурном интервале во всём диапазоне величин предварительной деформации. Выявлено, что такие характеристики как температура начала обратного фазового превращения и величина выделившейся тепловой энергии стабилизируются при достижении определенной истинной деформации (ϵ около 9), когда в обоих металлах формируется смешанная нано- субмикроструктурная структура, при которой наибольший энергетический вклад в систему вносят деформационные дефекты и протяженные межфазные границы.



Обозначения на рисунке: T_n – температура начала превращения, T_p – температура пика превращения, T_k – температура конца превращения

Рисунок 6.3 – Зависимость характеристических температур фазового $\omega \rightarrow \alpha$ превращения от угла поворота наковальни в титане (а) и в цирконии (б)

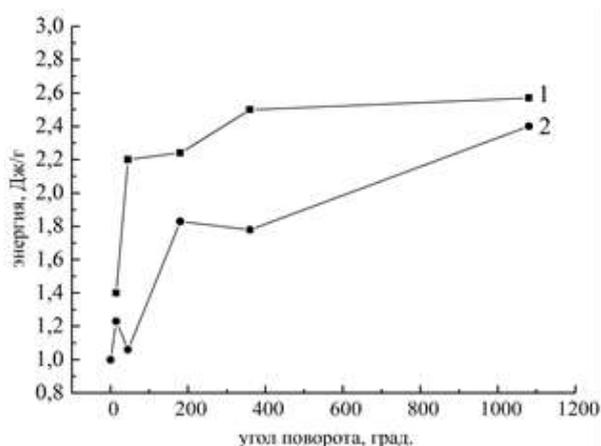


Рисунок 6.4 – зависимость удельной энтальпии обратного фазового $\alpha \rightarrow \omega$ превращения, от угла поворота наковальни: 1 – для титана, 2 – для циркония

Результаты опубликованы в 2022 году:

Calorimetry and Peculiarities of Reverse $\omega \rightarrow \alpha$ Phase Transformation in Zr and Ti Pseudo-Single Crystals [Текст] / L. Yu. Egorova, Yu. V. Khlebnikova, V. P. Pilyugin, N. N. Resnina // Physics of Metals and Metallography. — 2022. — V. 123. — P. 482—488.

6.4 Исследован новый класс интеллектуальных материалов, сочетающих свойства ферромагнетиков и сплавов с мартенситным превращением, которые демонстрируют уникальные эффекты влияния магнитных полей на структуру и физические свойства. Изучено влияние кобальта на фазовые переходы, магнитное упорядочение, структуру и свойства сплавов Ni-Co-Mn-In. Определены критические температуры магнитных и структурных фазовых переходов в сплаве $\text{Ni}_{43}\text{Co}_4\text{Mn}_{42}\text{In}_{11}$. Показано, что легирование кобальтом существенно увеличивает разность между температурой мартенситного превращения и температурой Кюри. Установлено, что при охлаждении в сплаве $\text{Ni}_{43}\text{Co}_4\text{Mn}_{42}\text{In}_{11}$ формируется морфологически сложная структура, состоящая из тонкопластинчатого модулированного и внутренне двойникового мартенсита. Проведен кристаллографический анализ мартенсита с использованием расчетных схем электронограмм и построения стереографических проекций. Для двойникового мартенсита определены индексы общего полюса (близкого к габитусной плоскости) в координатах двух фаз – аустенита $L2_1$ и мартенсита $14M$, которые характеризуют новое соотношение из параллельных плоскостей.

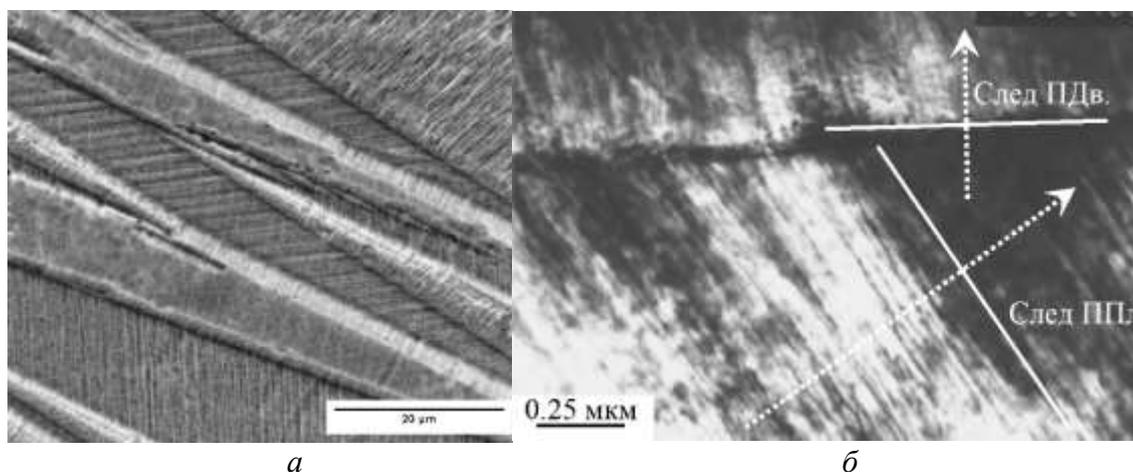


Рисунок 6.5 – Структура мартенсита в сплаве $\text{Ni}_{43}\text{Co}_4\text{Mn}_{42}\text{In}_{11}$ после отжига:
а, б - светлопольное изображение

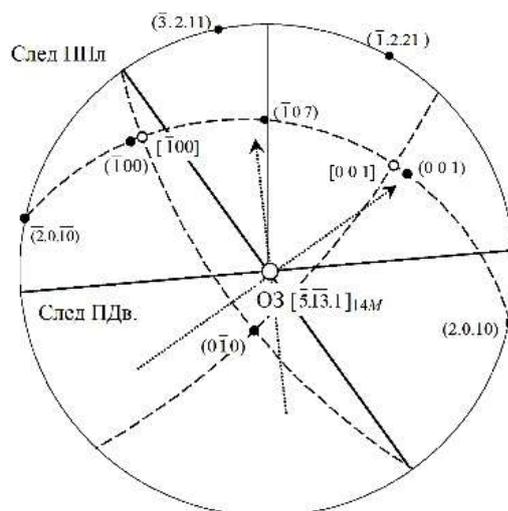
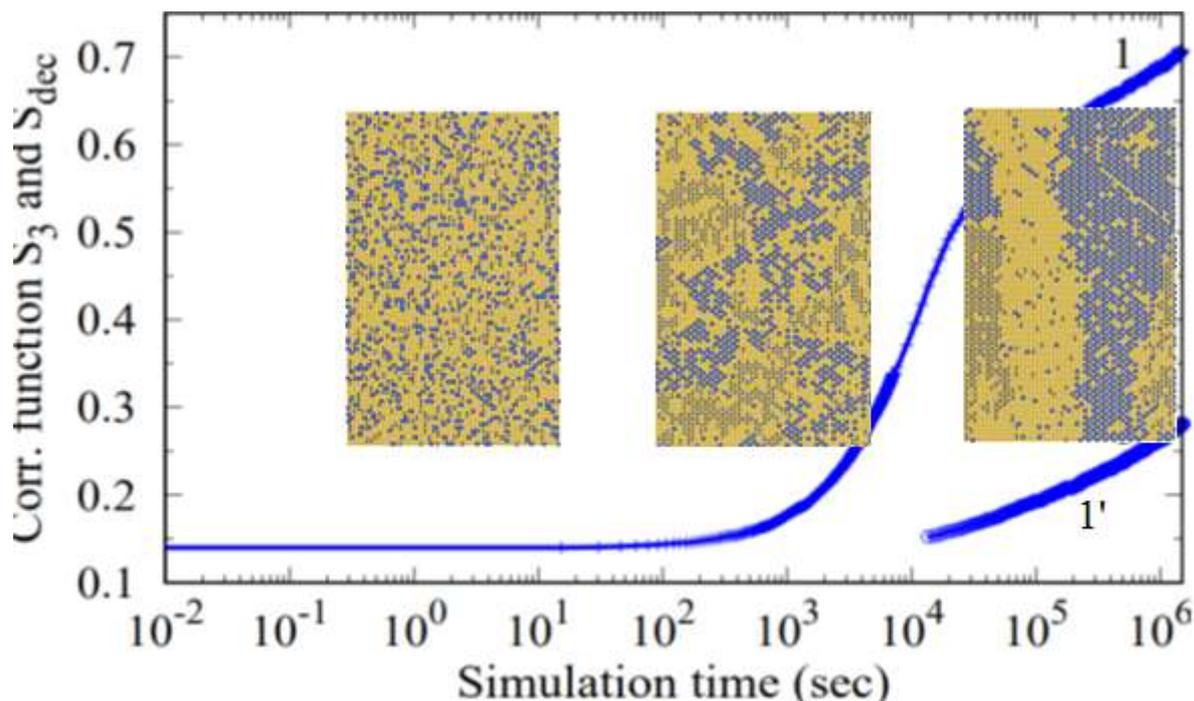


Рисунок 6.6 – Стереографическая проекция мартенсита с осью зоны $[\bar{5}.1\bar{3}.1]_{14M}$

Результаты опубликованы в 2022 году:

Martensitic Transformation and Magnetic Phase Transitions in Heusler Alloys with Cobalt Substituting for Nickel [Текст] / Yu.V. Kaletina, E.G. Gerasimov, A.Yu. Kaletin, V.A. Kazantsev // Physics of Metals and Metallography. — 2022. — V. 123. — P. 1156—1160.

6.5 Сплавы Ti-Al отличаются высокой удельной прочностью и хорошими жаропрочными свойствами, что делает их привлекательными для многих важных применений. Кинетика фазовых превращений в системе α – Ti-Al-X (X=Si, Zr) исследована посредством Монте-Карло моделирования с первопринципной параметризацией межатомных взаимодействий. Показано, что процессы упорядочения и распада в Ti-Al тесно взаимосвязаны, причем стадия однородного упорядочения предшествует формированию упорядоченных частиц Ti_3Al . Продолжительность стадии однородного упорядочения весьма чувствительна к выбору температуры отжига и состава сплава, что открывает возможность управления структурным состоянием. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и позволяют объяснить наблюдаемые особенности микроструктуры, формирующейся при отжиге сплавов Ti-Al-X (X=Si, Zr).



1 – корреляционная функция на третьей координационной сфере вокруг атомов Al,
1' – интегральная степень распада

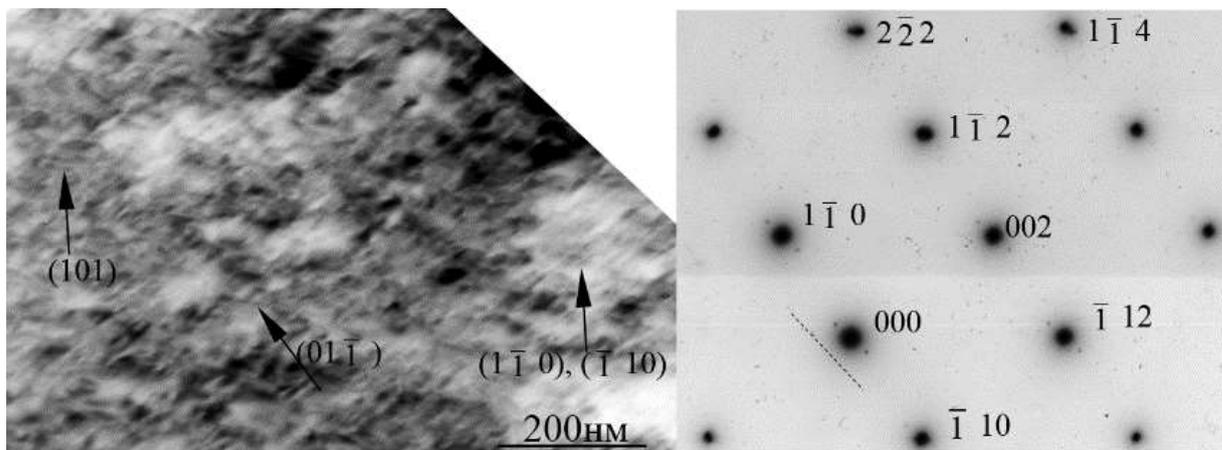
Рисунок 6.7 – Распределение атомов Al (синие кружки) в центральном сечении кристаллита Ti-14%Al при температуре 850 К в моменты времени $0.7 \cdot 10^4$ и $2.5 \cdot 10^6$ сек

Результаты опубликованы в 2022 году:

Kinetics of Ordering and Decomposition in Ti-Al-X (X = Si, Zr) Alloys: Monte Carlo Modeling[Текст] / M.V. Petrik, I.K. Razumov, I.A. Naschetnikova, Yu.N. Gornostyrev, A.A. Popov // Materials. — 2022. — V. 15. — P. 5722—5732.

6.6 Впервые установлено, что преобразование α -кристалла в процессе медленного нагрева в метастабильных сплавах Fe–Ni начинается с формирования модулированной структуры посредством контракционного смещения плоскостей типа (110) в направлении $[1\bar{1}0]$ (рисунок 6.8). Наночастицы промежуточной мартенситной фазы формируются на фоне модулированной структуры при 400–450 °С. Габитус частиц совпадает с плоскостями типа $(110)_\alpha$. Плоскостей $\{110\}$ в ОЦК-решетке шесть. Поэтому возможно формирование шести различных ориентаций частиц, а не 24. Сначала зарождаются пластинки γ -мартенсита. Повышающийся уровень когерентных напряжений в матрице релаксирует посредством периодических сдвигов в решётке γ -мартенсита, что последовательно приводит к формированию внутри γ -пластинок ϵ - и $18R$ -областей. Полная релаксация упругих напряжений с повышением температуры реализуется механизмом прямого + обратного мартенситного превращения в предварительно сдвойникованных γ -областях, что ведёт к созданию мелкозёрненной структуры сдвиговым механизмом вплоть до полного перехода сплава в парамагнитное состояние при 515 °С (рисунок 6.8) при сохранении состояния $\gamma+R$ с высокой плотностью дефектов упаковки, что и обуславливает упрочнение сплава.

На рисунке 6.9 показана мелкозёрненная структура $(\gamma+R)$ -фазы, сформировавшаяся на заключительной стадии перехода α -фазы в парамагнитное состояние (сканирующий микроскоп). Возникающие ориентации зёрен не произвольны, а связаны между собой сдвиговым механизмом зарождения, причём наиболее часто встречается разориентация в 60° . Этот экспериментальный факт объяснён механизмом прямых плюс обратных мартенситных превращений.



На рисунке показана модулированная структура, возникшая в результате сдвига плоскостей $(1\bar{1}0)$ или $(\bar{1}10)$, и соответствующая электронограмма (расщепление сателлитов указано пунктиром)

Рисунок 6.8 – Структура α -пластины после медленного нагрева до 380 °С

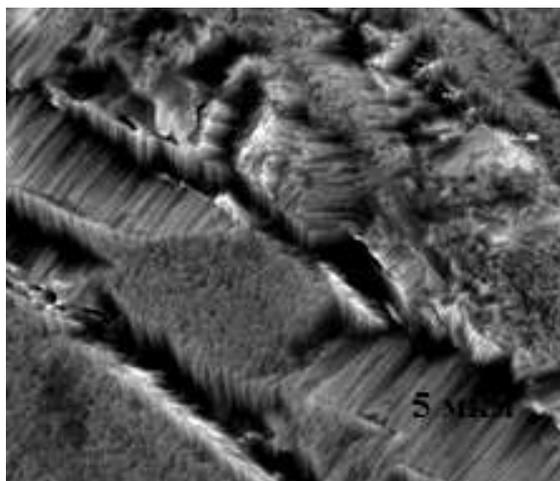


Рисунок 6.9 – Мелкозеренная структура (γ+R)-фазы

Результаты опубликованы в 2022 году:

Zemtsova, N.D. The Second Stage of the $\alpha \rightarrow \gamma$ Transformation during Slow Heating of Metastable Fe–Ni Alloys. Fine Structure of Dispersed γ -Martensite Plates [Текст] / N.D. Zemtsova // Crystallography Reports. — 2022. — V. 67. — P. 236—250.

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 Термическая стабильность СМК структуры охарактеризована температурой начала роста зерна и скоростью роста зерна при нагреве. Рост зерна зависит от особенностей структуры, обусловленных релаксационными процессами, действующими при ее формировании. Механическое двойникование при криогенной деформации не влияет на температуру начала роста зерна СМК железа. Скорость роста зерна при нагреве после криогенной деформации больше, чем после деформации при 20 °С: после отжига при 650 °С средний размер зерна различается на порядок. Динамическая рекристаллизация при 250 °С приводит к повышению температуры начала роста зерна, но и к наиболее высокой скорости роста зерна и началу вторичной рекристаллизации. Большая пластическая деформация при всех исследованных температурах позволяет получить в железе размерно однородную СМК структуру, однако механическое двойникование и динамическая рекристаллизация создают структурную неоднородность, что препятствует формированию однородной субмикрозернистой структуры при отжиге. В железе СМК структура с однородным распределением дефектов, полученная при 20 °С в условиях деформационного наклепа, обладает наиболее высокой термической стабильностью.

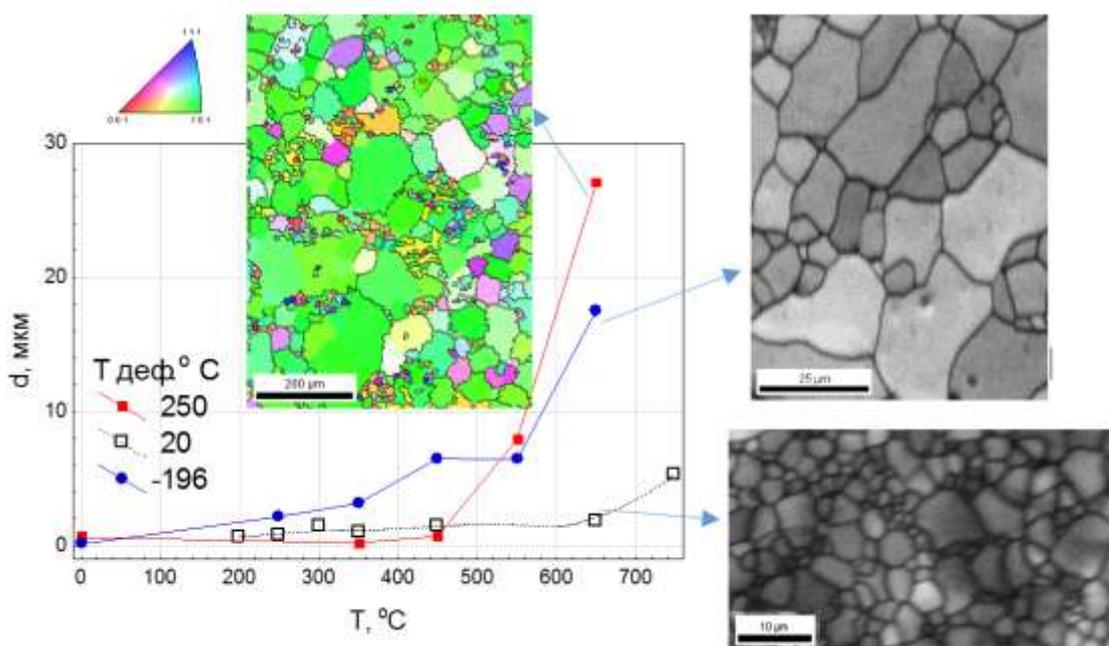


Рисунок 7.1 – Изменение среднего размера зерна при отжиге железа с СМК структурой, полученной в результате деформации при разных температурах, и структура после деформации и отжига при 650 °С, 1ч

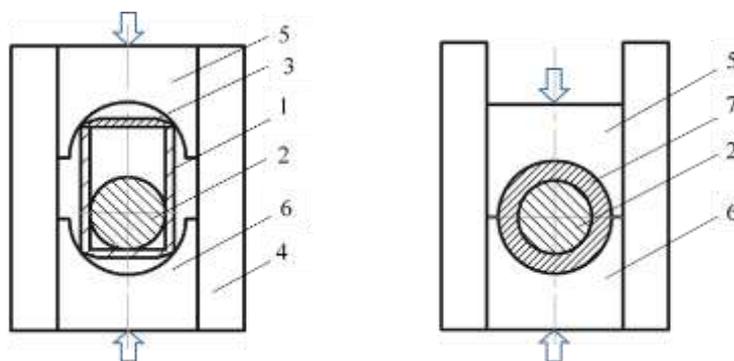
Результаты опубликованы в 2022 году:

Annealing-induced recrystallization of iron after high pressure torsion at 80 K [Текст] / К.Е. Shugaev, М. V. Degtyarev, L.M. Voronova, T.I. Chashchukhina, T.M. Gapontseva // Letters on Materials. — 2022. — V. 12. — P. 94—99.

The Growth of a Grain during the Annealing of Iron Deformed at 250°C by Shear under Pressure [Текст] / К. Е. Shugaev1, М. V. Degtyarev1, L. M. Voronova1, T. I. Chashchukhina // Physics of Metals and Metallography. — 2022. — V. 123. — P. 979—986.

7.2 Посредством решения краевых задач механики деформируемого тела изучены особенности холодной деформации магниевых заготовок в условиях высоких сжимающих напряжений, в частности осуществлена оценка напряженно-деформированного состояния. Некоторые теоретические результаты подверглись практической проверке. Также разработаны новые способы холодной деформации магния, с постановкой краевых задач посредством компьютерного моделирования, что позволило получить большой объем информации, рассмотреть и сопоставить большее количество альтернативных схем деформации, предотвратить появление дефектов и спрогнозировать качество изделия до того, как будет изготовлен инструмент. Основным результатом работы является установление связей между видами и параметрами холодной деформации магния, позволяющих получать продукцию с требуемыми свойствами. Результаты работы могут быть использованы для стабилизации процессов нефтедобычи с применением скважинного бурения. Получено 2 патента Российской Федерации:

- Композиционная заготовка для кузнечной осадки: пат. на полезную модель 212110 Рос. Федерация: МПК В21J 1/04 / Логинов Ю.Н., Замараева Ю.В. – № 2021116704; заявл. 07.06.2021; опубл. 06.07.2022, Бюл. № 19;
- Устройство для углового прессования: пат. 2780729 Рос. Федерация: МПК В21С 23/08 / Логинов Ю.Н., Замараева Ю.В.– № 2021115016; заявл. 25.05.2021; опубл. 29.09.2022, Бюл. № 28.



а

б

- 1 – магниевая оболочка,
- 2 – стальной шар,
- 3 – крышка,
- 4 – контейнер пресса,
- 5 – верхний пуансон,
- 6 – нижний пуансон,
- 7 – полый шар

а) перед деформацией;

б) после деформации при идеализированной картине в отсутствии трения

Рисунок 7.2 – Общая схема разработанного способа получения шара с магниевой оболочкой

Результаты опубликованы в 2022 году:

Логинов, Ю.Н. Моделирование штамповки биметаллического шара с оболочкой из магния [Текст] / Ю.Н. Логинов, Ю.В. Замараева // Технология легких сплавов. — 2022. — V. -. — P. 75—82.

Логинов, Ю.Н. Сжатие цилиндрической заготовки в полости деформируемой обоймы бойками малого диаметра [Текст] / Логинов Ю.Н., Замараева Ю.В. // Кузнечно-штамповочное производство. Обработка материалов давлением. – 2022. – №5. – С. 22-27.

7.3 Скорость Ферми, v_F , является одной из основных характеристик проводников. При этом соединения принадлежащие к одному химическому классу, имеющие близкую кристаллохимическую структуру, вероятнее всего будут обладать близкими v_F и, в этом случае, можно охарактеризовать данный класс материалов универсальной v_F . Подтверждением этой гипотезы, служит работа X. J. Zhou *et al* (*Nature* 423, 398 (2003)) сообщающая об обнаружении универсальной нодальной $v_{F,HTS} = (2.5 \pm 0.5) \cdot 10^5$ m/s в высокотемпературных купратах (данные из вышеупомянутой статьи приведены на рисунке 7.3). Данные сверхпроводники имеют общий кристаллохимический элемент: плоскости CuO_2 , в которых и возникает высокотемпературная сверхпроводимость. Цель данной работы: поиск существования универсальной v_F в гидридных сверхпроводниках обладающих общим кристаллохимическим элементом: металлизированными связями «водород-водород». Проведенный анализ экспериментальных данных по верхнему критическому полю в H_3S , LaH_{10} , CeH_9 , $\text{Y}(\text{H,D})_6$, $(\text{La,Y})\text{H}_{10}$, SnH_{12} , ThH_9 , ThH_{10} , показал, что этот класс сверхпроводников имеет универсальную скорость Ферми, $v_{F,univ\text{hydrides}} = (3.2 \pm 0.6) \cdot 10^5$ m/s, которая близка по величине к универсальной $v_{F,HTS}$ в купратах.

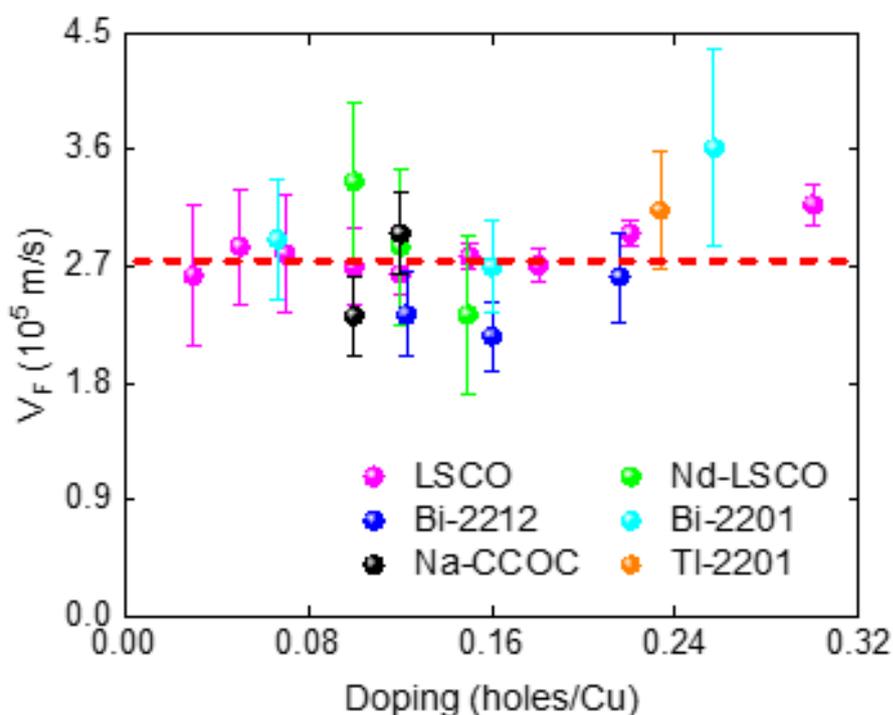


Рисунок 7.3 – Универсальная нодальная (узловая) скорость Ферми в высокотемпературных купратных сверхпроводниках

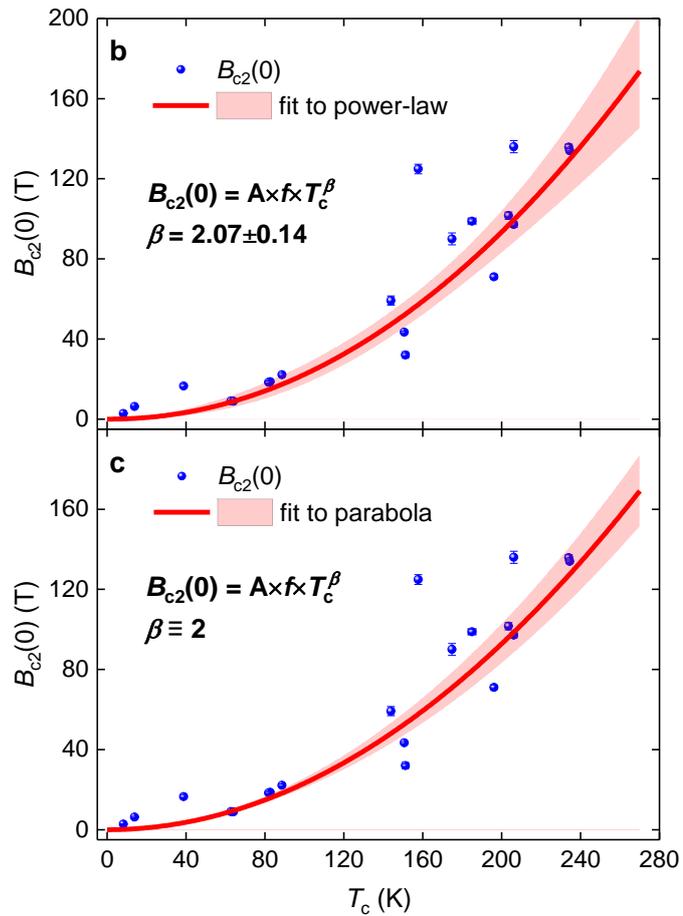


Рисунок 7.4 – Аппроксимация амплитуды верхнего критического поля, $B_{c2}(0)$, гидридных сверхпроводников функцией $B_{c2}(0) = A \times f \times T_c^\beta$

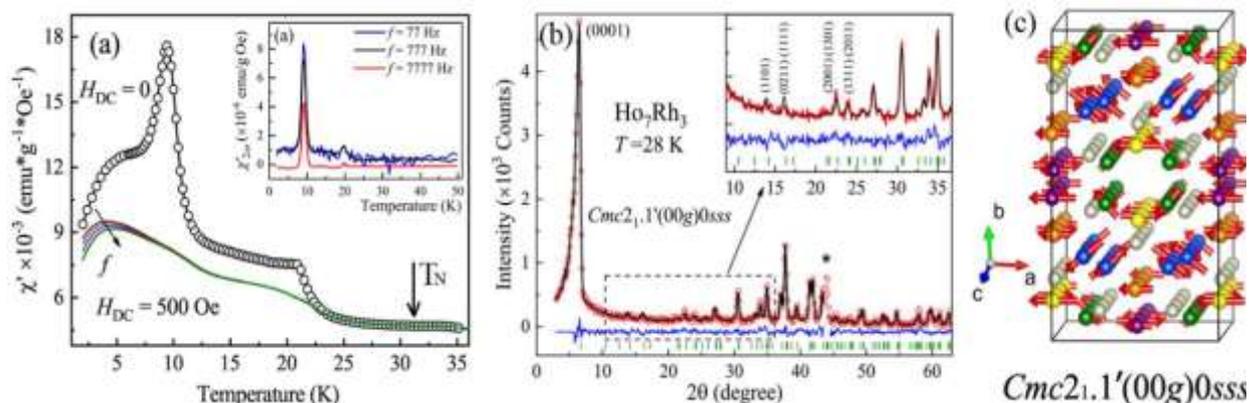
Результаты опубликованы в 2022 году:

Talantsev, E.F. Universal Fermi velocity in highly compressed hydride superconductors [Текст] / E.F. Talantsev // Matter and Radiation at Extremes. — 2022. — V. 7. — P. 58403—58410.

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

8.1. Проведено комплексное исследование и полное количественное описание несоизмеримых магнитных фаз в бинарном интерметаллиде Ho_7Rh_3 при помощи нового подхода, основанного на использовании магнитных суперпространственных групп.

С помощью нейтронной дифракции и измерений магнитных свойств, теплоемкости и теплового расширения установлена магнитная фазовая диаграмма бинарного редкоземельного интерметаллида с нецентросимметричной структурой Ho_7Rh_3 . Впервые для соединений группы R_7Rh_3 получены прямые экспериментальные доказательства существования ближнего магнитного порядка в парамагнитном состоянии в широком интервале температур $T_N < T < 2T_N$. При этом для соединений семейства R_7Rh_3 установлено, что магнитный фазовый переход в несоизмеримую магнитную фазу при температуре Нееля $T_N = 32$ К описывается в рамках концепции одного неприводимого представления Ландау. Впервые проведено полное количественное описание низкотемпературной несоизмеримой магнитной структуры в рамках формализма магнитных суперпространственных групп. Показано, что данные АС-магнитной восприимчивости могут быть источником дополнительной информации об эффектах нарушения симметрии в магнитной подсистеме и упрощать применение формализма магнитных суперпространственных групп к анализу и симметричному описанию сложных несоизмеримых магнитных фаз. При помощи синхротронной дифракции и измерений теплового расширения установлено, что кристаллическая структура Ho_7Rh_3 остается гексагональной во всем интервале температур выше и ниже температуры Нееля.



- (a) Температурная зависимость АС-магнитной восприимчивости в нулевом $H_{DC}=0$ и внешнем магнитном поле $H_{DC}=500$ Э. На вставке изображена температурная зависимость 2-ой гармоники АС-восприимчивости в нулевом поле.
- (b) Результат аппроксимации нейтронограммы порошкового образца Ho_7Rh_3 , измеренной в магнитоупорядоченном состоянии при температуре $T=28$ К.
- (c) Уточненная модель несоизмеримой магнитной структуры Ho_7Rh_3 , описанная магнитной суперпространственной группой $Cmc2_1.1'(00g)0sss$.

Рисунок 8.1 – Результаты обработки экспериментальных данных для соединения Ho_7Rh_3

Результаты исследований опубликованы в 2022 году:

Magnetic incommensurability, short-range correlations, and properties of Ho_7Rh_3 [Текст] / А. F. Gubkin, А.А. Vaulin, Т. Tsutaoka, А.Ф. Prekul, К.Р. Skokov, N. V. Baranov// Physical Review B. – 2022. – Vol. 106. – P. 134419-1 – 134419-12. – DOI: 10.1103/PhysRevB.106.134419.

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

9.1 В результате теоретических и экспериментальных исследований были найдены магнитные параметры, отличающиеся чувствительностью к толщине и механическим свойствам упрочненного слоя. Разработана методика селективного контроля глубины и качества поверхностного упрочнения, заключающаяся в определении с помощью одного локального преобразователя в одном измерительном цикле значений коэрцитивной силы контролируемой зоны объекта и магнитного потока в цепи «преобразователь-объект», причем качественное поверхностное упрочнение предполагает одновременное попадание значений диагностических параметров в заранее определенные интервалы. Предложенные диагностические параметры могут быть измерены с помощью аппаратно-программной системы DIUS-1.15M или других аналогичных устройств. Получен патент Российской Федерации на изобретение № 2782884 «Способ селективного контроля глубины и качества поверхностного упрочнения изделий из ферромагнитных материалов». Методика может быть использована на предприятиях машиностроительного комплекса для контроля поверхностно упрочнённых деталей в автомобилестроении, станкостроении и других отраслях.

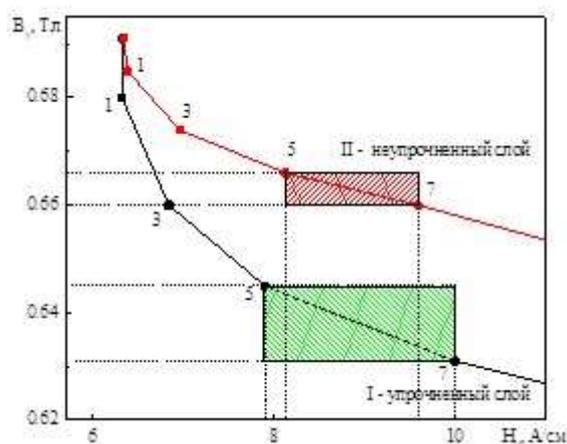


Рисунок 9.1 – Пояснение алгоритма селективной оценки качества поверхностного упрочнения при двустороннем ограничении толщины слоя, зависимость магнитного потока (магнитной индукции) в магнитопроводе от напряженности магнитного поля в объекте контроля

Результаты исследований опубликованы в 2022 году:

Magnetic field distribution in steel objects with different properties of hardened layer [Текст] / A.V. Byzov, D.G. Ksenofontov, V.N. Kostin, O.N. Vasilenko // Advances in Computational Design. — 2022. — V. 7. — P. 57—68.

9.2 Впервые разработана методика, позволяющая определять форму поверхностных дефектов ферромагнитной пластины по измеренным над поверхностью компонентам магнитного поля. Методика позволяет восстанавливать форму дефектов при измерении компонент магнитного поля вблизи любой поверхности пластины (поверхности с дефектом, либо бездефектной поверхности). На первом этапе использования методики измеренные в воздухе компоненты магнитного поля пересчитываются в металл, на границу металл – воздух на бездефектной поверхности. На втором этапе магнитное поле в металле восстанавливается, с помощью решения уравнений Максвелла для случая магнитостатики, в предположении, что всюду ниже упомянутой границы также находится металл. На третьем этапе для определения формы дефекта по границам поверхностей пластины в металле строятся две силовые магнитные линии. Между ними по определению магнитный поток не выходит. В действительности, величина магнитного потока, выходящего за пределы этих рассчитанных силовых линий (т.е. за пределы ферромагнетика), много меньше величины магнитного потока в металле, поэтому выходом потока даже в зоне дефекта, при использовании методики, можно пренебречь. На рисунке 9.2 приведены силовые магнитные линии для дефекта типа раковина, построенные в результате решения прямой задачи в программе FEMM (4 и 5) и построенные по предложенной методике (6). В качестве начальных данных для построения силовых линий по предложенной методике также были взяты значения компонент магнитного поля, рассчитанные в программе FEMM в воздухе, на некотором удалении от поверхности пластины. До уровня глубины дефекта силовые магнитные линии, вычисленные двумя способами, совпадают (штрихованные линии 1-3 на рисунке 9.2). До силовой магнитной линии, обозначенной на рисунке цифрой 4, магнитные линии, полученные в результате решения прямой задачи, выходят из металла, подобно магнитной линии с номером 5. Линия 6 хорошо описывает форму дефекта

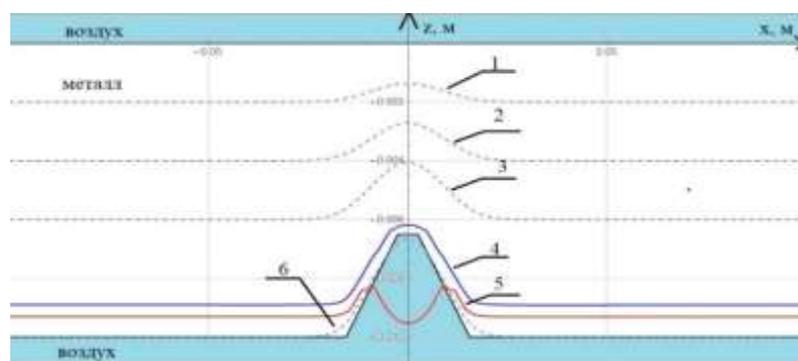


Рисунок 9.2 – Силовые магнитные линии для дефекта типа раковина

Результаты исследований опубликованы в 2022 году:

Verification of a Technique for Reconstructing the Shape of Defects in Soft Magnetic Ferromagnets Using MFL Data [Текст] / A. V. Nikitin, A. V. Mikhailov, L. V. Mikhailov, Yu. L. Gobov, V. N. Kostin, Ya. G. Smorodinskii // Russian Journal of Nondestructive Testing. — 2022. — V. 58. — No. 11. — P. 1011—1017.

Методика решения обратной геометрической задачи магнитостатики для поверхностных дефектов магнитомягкого ферромагнетика [Текст] / А. В. Никитин, Ю. Л. Гобов, А. В. Михайлов, Л. В. Михайлов // Дефектоскопия. — 2022. — № 12. — С. 24—34.

9.3 Проведены исследования текстуры, фазового состава и магнитной анизотропии в деформированных прокаткой образцах из коррозионно-стойкой аустенитной стали 09X17H5Ю при образовании в них мартенсита деформации. Показано, что на результаты измерений относительной магнитной проницаемости влияет ее анизотропия, которая связана с появлением механической текстуры прокатки. Во всех исследованных деформированных образцах обнаружено формирование ограниченной ГЦК текстуры прокатки. Формирование текстуры, характерной для ОЦК структуры, начинается с 30 % деформации аустенитного образца. Образование ферромагнитного мартенсита деформации в аустенитной стали 09X17H5Ю подтверждено методом магнитно-силовой микроскопии.

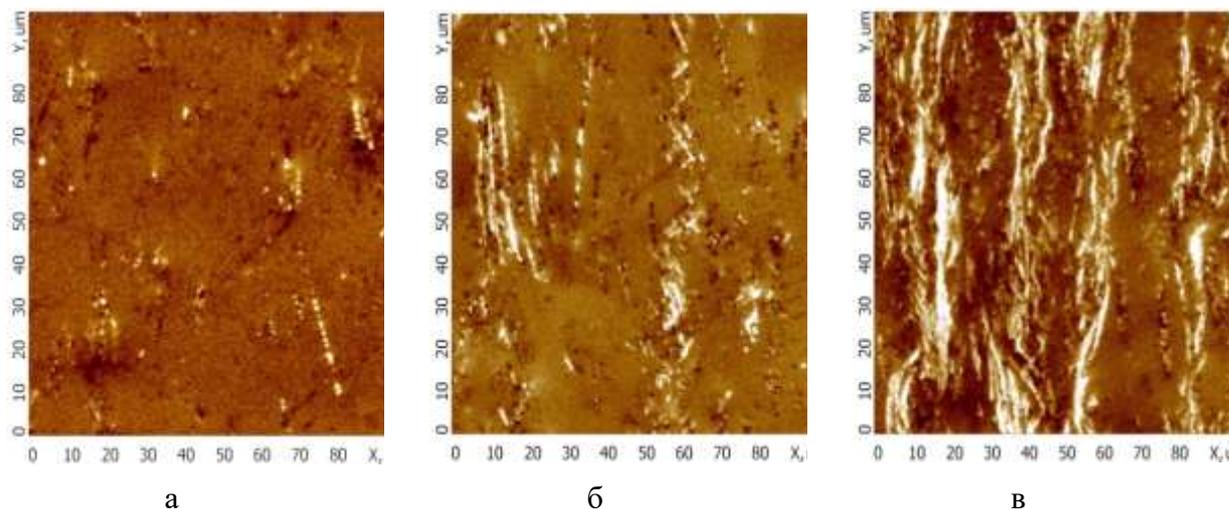


Рисунок 9.3 – Изображения магнитно-силовой микроскопии для образцов со степенью деформации: а – 16 %, б – 31 %, в – 55 %

Результаты исследований опубликованы в 2022 году:

Application of magnetic methods of non-destructive testing for the analysis of magnetic anisotropy in austenitic steel samples after deformation [Текст] / А. В. Kochnev, Y. N. Koemets, М. В. Rigmant, N. V. Kazantseva, М. К. Korkh // AIP Conference Proceedings. — 2022. — V. 2466. — P. 60034—60039.