

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Челябинский государственный университет»

АtoM

FROM ATOMISTIC TO MACRO

Сборник тезисов

**Второй всероссийской школы-семинара
по компьютерному моделированию**

23–25 сентября 2025 года

Челябинск, Россия

Челябинск
Издательство Челябинского государственного университета
2025

УДК 004
ББК А62
А90

Организационный комитет школы-семинара

В. Д. Бучельников (председатель), *М. А. Загребин* (зам. председателя),
М. В. Матюнина (секретарь), *П. А. Безбородова*, *М. В. Утарбекова*

Программный комитет школы-семинара

С. В. Таскаев (председатель), *И. В. Бычков* (зам. председателя),
А. Е. Майер (зам. председателя), *В. В. Соколовский*, *Д. А. Кузьмин*,
В. В. Погорелко, *С. А. Хайбрахманов*, *О. Н. Мирошкина*

Ответственный за выпуск *М. А. Загребин*

Семинар проводится при финансовом сопровождении
фонда поддержки научных мероприятий ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

AtoM: from atomistic to macro : сб. тез. Второй всерос. шк.-семинара
А90 по компьютер. моделированию (23–25 сент. 2025 г., Челябинск, Россия). —
Челябинск : Изд-во Челяб. гос. ун-та, 2025. — 37 с.
ISBN 978-5-7271-2085-9

Тезисы посвящены последним достижениям, современному состоянию
и новым идеям в области компьютерного дизайна, исследования
разноуровневыми методами компьютерного моделирования
функциональных свойств в новых материалах.

Результаты исследований, представленные в сборнике, могут быть
использованы в системе обучения и переподготовки кадров. Адресовано
научным работникам, аспирантам и студентам физических и
математических факультетов.

Материалы публикуются в авторской редакции.

УДК 004.9(082)
ББК А62я43

ИССЛЕДОВАНИЕ *AB-INITIO* ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СПЛАВА Mn_3Al

И.В. Артамонов^{1,*}, М.А. Загребин¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*artamonovv97@mail.ru

Сплавы Гейслера всегда представляли интерес из-за разнообразия наблюдающихся в нем комбинаций структур и фазовых переходов, вызываемых изменением внешних параметров. В последнее время ряд сплавов на основе Mn_2 являются объектами интенсивного теоретического и экспериментального изучения с целью применения в спинтронике. Данные сплавы интересны тем, что в них наблюдаются два состояния с различными свойствами, которыми можно управлять с помощью внешнего гидростатического и внутреннего химического давлений [1]. Такое разнообразие паттернов поведения этих сплавов показывает их значимость и потенциал в качестве возможного использования в спинтронике [1].

В данной работе с помощью вычислительного пакета VASP (*Vienna Ab initio Simulation Package*) [2,3] методами теории функционала плотности с использованием функционалов GGA-PBE (*Perdew–Burke–Ernzerhof*) [4] и Meta-GGA SCAN (*strongly constrained and appropriately normed*) [5] исследованы основное магнитное состояние и электронные свойства сплава Гейслера Mn_3Al в зависимости от приложенного гидростатического давления. В результате геометрической оптимизации кристаллической решетки с применением двух разных функционалов SCAN и PBE показано, что при расчетах Meta-GGA SCAN (рис. 1) высоко-магнитное состояние (*high-magnetic state – HMS*) при нормальном давлении является основным для ферримагнитной (ФМ) конфигурации с антипараллельной ориентацией атомов Mn, а при приложении давления больше 3 ГПа основным становится низко-магнитное состояние (*low-magnetic state – LMS*). Анализ плотности электронных состояний для каждого случая показал, что HMS характеризуется поведением полуметаллического ферромагнетика, в то время как LMS – металлического ферромагнетика.

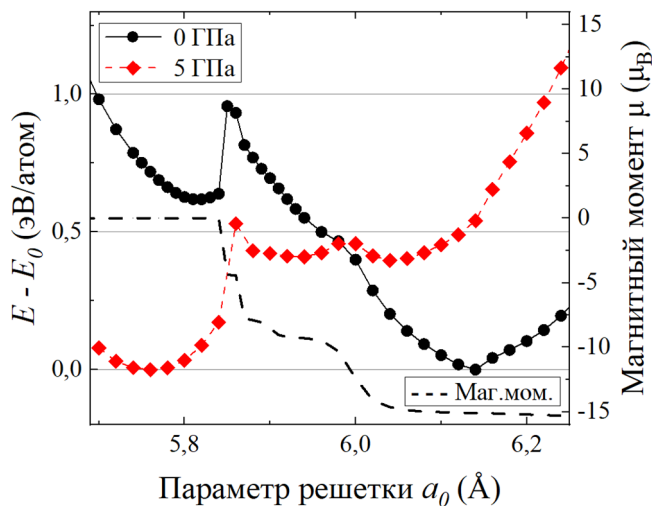


Рис. 1. Зависимости полной энергии (слева) и полного магнитного момента (справа) от параметра решетки, рассчитанные при давлении 0 и 5 ГПа для сплава Mn_3Al

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № 075-00186-25-00.

- [1] V.V. Marchenkov, V.Y. Irkhin, *Materials*, **16** (2023) 6351.
- [2] G. Kresse, J. Furthmüller, *Physical Review B*, **54** (1996) 11169.
- [3] G. Kresse, D. Joubert, *Phys. Rev. B.*, **59** (1999) 1758.
- [4] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996) 3865.
- [5] J. Sun, A. Ruzsinszky, J.P. Perdew, *Phys. Rev. Lett.*, **115** (2015) 036402.

АНАЛИЗ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ ДИСПЕРСИЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ, ТЕПЛОЕМКОСТИ И ВОСПРИИМЧИВОСТИ В ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ ДЛЯ РАЗНЫХ ТИПОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ БЕСПОРЯДКА

Г.Я. Атаева^{1,*}, А.Б. Бабаев^{1,2}, А.К. Муртазаев^{1,3}

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный педагогический университет им. Р. Гамзатова, Махачкала, Россия

³ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

*ataeva20102014@mail.ru

Немагнитные примеси могут существенно модифицировать свойства магнитных материалов, влияя на температуру фазового перехода, критические показатели и даже на саму природу фазового перехода [1]. В работе проведен сопоставительный анализ относительных дисперсий термодинамических параметров для канонического и большого канонического ансамбля, в слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке методами Монте-Карло.

Гамильтониан системы имеет вид [2]:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = P_1, P_2, P_3, P_4$$

В таблице 1 приведены полученные значения относительных дисперсий для намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_c как функции от L , для двух ансамблей, при концентрации спинов $p=0.90$.

Табл. 1. Показатели относительных дисперсий R_m , R_χ и R_c для слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса при $p=0.90$, для канонического и большого канонического ансамблей.

L	T_c	R_m	R_χ	R_c
Канонический ансамбль				
12	0.519	0.00176	0.09489	0.01533
15		0.00164	0.09363	0.01781
21		0.00182	0.08131	0.01957
24		0.00131	0.07664	0.01652
45		0.00122	0.06682	0.01164
Большой канонический ансамбль				
L	T_c	R_m	R_χ	R_c
12	0.519	0.02271	0.28508	0.04604
15		0.02512	0.26868	0.04040
18		0.02517	0.26779	0.03419
21		0.03046	0.25889	0.03710

Проведенные методом Монте-Карло исследования выявили, что на термодинамические характеристики сильное влияние оказывает способ распределения немагнитного беспорядка, происходит нарушение в самоусреднении исследуемых термодинамических параметров моделируемой системы, на что указывают ненулевые значения R_m , R_χ и R_c . Обнаружено, что предельные значения относительных дисперсий R_m , R_χ и R_c полученные в случае большого канонического ансамбля при $L \rightarrow \infty$ значительно отличаются от соответствующих значений в каноническом ансамбле.

[1] V.S.Dotsenko, *Usp. Fiz. Nauk*, **165** (1995) 481.

[2] F.Y.Wu. *Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics*, World Scientific, London, 2009.

ВЛИЯНИЕ ВМОРОЖЕННОГО НЕМАГНИТНОГО БЕСПОРЯДКА НА КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МОДЕЛЯХ ПОТТСА

А.Б. Бабаев^{1,2,*}, А.К. Муртазаев^{1,3}, Г.Я. Атаева¹, М.А. Бабаев³

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия

³ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

*b_albert78@mail.ru

Изучение влияния замороженного беспорядка на фазовые переходы и критическое поведение является одной из важных задач в физике конденсированных сред. Как известно, некоррелированный замороженный беспорядок существенен, если критический индекс теплоемкости α для однородной спиновой системы положителен [1].

Из фазовой диаграммы (см. рис.1), полученной на основе теоретических приближений [2], следует, что в двумерной трехкомпонентной ($q=3$, q – число состояний спина) модели Поттса должен наблюдаться фазовый переход второго рода.

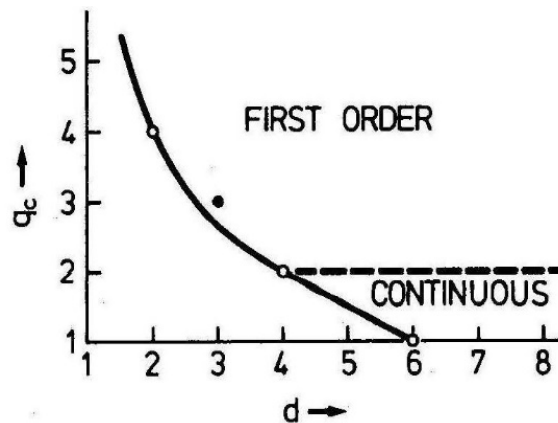


Рис. 1. Фазовая диаграмма для модели Поттса

Конечно-размерный анализ данных, проведенный для неразбавленной модели Поттса с $q=3$ на квадратной решетке, подтверждает наличие фазового перехода второго рода с критическими показателями характерными, для класса универсальности двумерной трехкомпонентной модели Поттса (см. [3]). В соответствии с критерием Харриса [1] для модели Поттса с $q=3$ примеси должны повлиять на критическое поведение в силу того, что для этой модели теория в неразбавленном режиме предсказывает критический индекс для теплоемкости $\alpha > 0$, $\alpha = 1/3$ [4]. Однако вопрос об универсальности новых критических индексов для рассматриваемой модели Поттса на квадратной решетке в разбавленном режиме остается открытым.

На основе применения теории конечно-размерного скейлинга методом Монте-Карло определены критические индексы теплоемкости α , намагниченности β , восприимчивости γ и критический индекс радиуса корреляции ν при концентрации спинов $p=1.00, 0.95, 0.90, 0.80$. Показано, что класс универсальности слабо разбавленной трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке описывается новым набором критических индексов, и этот набор отличается от соответствующего для чистой модели Поттса ($p=1.00$).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-12-20029.

[1] A.B. Harris, *J. Phys. C*, **7** (1974) 1671.

[2] Р. Бекстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва, 1985.

[3] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, *Вычислительная физика и проблемы фазовых переходов*, Физматлит, Москва, 2023.

[4] D. Loison, *Phys. Lett. A.*, **257** (1999) 83.

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ МАГНИТНЫХ СИЛОВЫХ ТРУБОК В АККРЕЦИОННЫХ ДИСКАХ

Н.В. Бартая^{1,*}, С.А. Хайбрахманов^{2,1}

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

*nody.email@gmail.com

Представляется численная модель динамики тонких тороидальных магнитных силовых трубок в аккреционных дисках молодых звёзд. Движение магнитных силовых трубок вдоль оси вращения диска моделируется с учётом сил плавучести и сопротивления, а также давления внешнего крупномасштабного магнитного поля [1]. Эволюция в плоскости диска рассчитывается с учётом внутренних магнитных натяжений, внешних газового и магнитного давлений, гравитации центрального объекта и центробежной силы. Для расчета тепловой эволюции магнитных силовых трубок реализовано три модели: изотермическое движение, адиабатическое движение и движение с учетом лучистого теплообмена с окружающим газом. Структура диска определяется с помощью модели аккреционных дисков Дудорова и Хайбрахманова [2,3].

Численная модель реализована в модульном коде на языке программирования C++. Уравнения динамики магнитных силовых трубок решаются с помощью метода Рунге–Кутты 4-порядка с автоматическим выбором шага либо с помощью полностью неявного метода Гира. Контроль точности расчета осуществляется по норме невязки. Используется ограничение максимального шага по времени для повышения устойчивости. Код реализован в виде кроссплатформенного консольного приложения. Параметры модели задаются через интерфейс чтения текстовых конфигурационных файлов. Программный комплекс позволяет проводить расчёты в широком диапазоне параметров магнитных силовых трубок. Добротность реализованных численных алгоритмов подтверждена на тестовых задачах с известными аналитическими решениями.

Расчёты динамики магнитных силовых трубок, проведенные с помощью кода, показывают, что магнитные силовые трубки всплывают в атмосферу над диском со сверхзвуковыми скоростями до 4 км/с, расширяясь до размеров, сравнимых со шкалой высот диска, и формируя неоднородную замагниченную корону. Радиальное движение характеризуется затухающими колебаниями со скоростями до 500 м/с, вызванными установлением баланса между центробежными, магнитными силами и силой гравитации. Образование и всплытие магнитных силовых трубок является эффективным механизмом отвода избыточного магнитного потока. Одна силовая трубка может переносить в атмосферу диска до 10^{34} эрг магнитной энергии, что может обуславливать вспышечную активность за счет магнитного пересоединения. Перенос массы и углового момента в корону может объяснять неоднородность истечений из дисков молодых звёзд и способствовать нестационарным процессам аккреции.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФПНИ проект 2025/7.

[1] A.E. Dudorov, S.A. Khaibrakhmanov, A.M. Sobolev, *MNRAS*, **487** (2019) 5388.

[2] А.Е. Дудоров, С.А. Хайбрахманов, *Вестн. ЧелГУ*. **9(300)**, вып.16. Физ. (2013) 40.

[3] А.Е. Дудоров, С.А. Хайбрахманов, *Вестн. ЧелГУ*. **9(300)**, вып.16. Физ. (2013) 27.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И УПРУГИХ СВОЙСТВ СПЛАВА Fe₃Ga

П.А. Безбородова^{1,*}, М.А. Загребин¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*ibragimova-polin@mail.ru

Разработка функциональных материалов с контролируемыми свойствами является актуальной задачей в области современного материаловедения. В этом контексте перспективным направлением выступает исследование магнитострикционных сплавов системы Fe-Ga (также известных как галфенолы), для которых необходимо дальнейшее изучения взаимосвязи между фазовым составом, микроструктурой и функциональными свойствами сплава [1]. Экспериментальное изучение сплавов системы Fe-Ga сопряжено с рядом существенных сложностей, которые обусловлены именно их уникальными функциональными свойствами.

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование сплавов Fe-Ga позволяет преодолеть ограничения эксперимента и является мощным инструментом для изучения их уникальных магнитно-механических свойств. Основная сложность для МД моделирования сплавов Fe-Ga – нет потенциала межатомного взаимодействия, который корректно описывает сложное упорядочение атомов Fe и Ga, и магнитные взаимодействия. Из-за отсутствия многочастичного межатомного потенциала для системы Fe-Ga в существующей литературе, комбинация нескольких потенциалов для описания взаимодействий Fe-Fe, Ga-Ga и Fe-Ga по отдельности является разумным решением. Такая комбинация реализуется с помощью «гибридного» стиля силового поля в программном пакете LAMMPS [2], используемого в нашем исследовании. Взаимодействия Fe-Fe описываются потенциалом [3] типа модели вложенного атома [4]. Этот потенциал был успешно использован и проверен экспериментальными данными в работах по МД-моделированию [5]. Потенциал Морзе используется для парных взаимодействий Ga-Ga. Мы также используем потенциал Морзе для взаимодействий Fe-Ga с потенциальной энергией для пары атомов, разделенных расстоянием r , где D_0 , α и r_0 – подгоночные параметры. Значения этих параметров подбирались из расчетов в рамках теории функционала плотности.

В нашей работе была создана идеальная структура Fe₃Ga: используется ОЦК суперячейка 2×2×2 Fe (16 атомов), где 25% (4 атома) Fe заменены на Ga. Параметр решетки Fe – 2.855 Å. С помощью МД моделирования показан процесс образования и разрушения упорядоченной структуры $D0_3$ и миграции точечных дефектов. Проведена идентификация стабильных фаз при разных концентрациях Ga и температурах. Рассчитаны модули упругости для фазы $D0_3$.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20086, <https://rscf.ru/project/24-22-20086/>.

- [1] I.S. Golovin, V.V. Palacheva, A.K. Mohamed et al., *Phys. Metals Metallogr.* **121** (2020) 851.
- [2] S. Plimpton, *J. Comput. Phys.* **117** (1995) 1.
- [3] S. Chiesa et al. *J. Phys.: Condens. Matter.* **23** (2011) 206001.
- [4] M.S. Daw, M.I. Baskes, *Phys. Rev. B.* **29** (1984) 6443.
- [5] V.V. Pogorelko, A.E. Mayer, *Int. J. Plast.* **167** (2023) 103678.

ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА KScPb В КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЕ

В.Д. Бучельников^{1,*}, А.А. Ененко¹, М.В. Матюнина¹, В.В. Соколовский¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск 454001, Россия

*buche@csu.ru

Полугейслеровские соединения представляют особый интерес для исследователей благодаря своим потенциальным термоэлектрическим свойствам [1]. Эти материалы выделяются прежде всего своими выдающимися характеристиками в области электропроводности. Однако у них есть существенный недостаток — высокая решёточная теплопроводность (κ_L). Это ставит их в менее выгодное положение по сравнению с некоторыми современными термоэлектрическими материалами, особенно с соединениями IV-VI групп. Для иллюстрации этого недостатка можно привести конкретные примеры. Так, соединение ZrCoBi [2] демонстрирует относительно низкую (среди полугейслеровских материалов) решёточную теплопроводность — 10 Вт/(м·К) при температуре 300 К. При этом у широко используемого термоэлектрического материала PbTe этот показатель значительно ниже — всего 2 Вт/(м·К) [3]. Исходя из этого, учёные стремятся найти новые полупроводниковые материалы. Они должны сочетать в себе электронные свойства полугейслеровских соединений с более низкой решёточной теплопроводностью. Это позволит создать более эффективные термоэлектрические материалы для практического применения.

В данной работе методом теории функционала плотности исследованы решёточная теплопроводность и термоэлектрические свойства полугейслеровского сплава KScPb в кубической фазе. Решеточная теплопроводность этого сплава, рассчитанная в квазиангармоническом приближении Дебая, при 300 К составляет около 0.4 Вт/(мК). Это значение ниже, чем у рассмотренного выше сплава ZrCoBi. На основе полученной решёточной теплопроводности в данной работе с помощью программного пакета BoltzTraP2, использующего транспортное уравнение Больцмана, были рассчитаны термоэлектрические свойства сплава: коэффициент Зеебека, время релаксации электронов, электронные проводимость и теплопроводность, фактор мощности и коэффициент термоэлектрической добротности. Термоэлектрическая добротность zT для сплава KScPb при $T=300$ К и оптимальном уровне допирования электронами (n -тип) и дырками (p -тип) приведена в таблице 1.

Табл. 1. Термоэлектрическая добротность спла KScPb при $T=300$ К.

Сплав	Концентрация носителей (см ⁻³)	zT
KScPb	$n: 1.84 \times 10^{20}$	0.88
	$p: 3.37 \times 10^{20}$	1.28

При указанном уровне допирования сплава дырками (p) и электронами (n) рассчитана температурная зависимость коэффициента термоэлектрической добротности, представленная на рисунке 1.

Из рисунка 1 следует, что при указанном уровне допирования термоэлектрическая добротность $zT = S^2 \sigma / (\kappa_{el} + \kappa_L)$ растёт с увеличением температуры, достигая значения около 5 в области температуры 750 К, а затем уменьшается с дальнейшим ростом температуры. Такое поведение обусловлено тем, что с ростом температуры фактор мощности $PF = S^2 \sigma$ уменьшается медленнее, а полная теплопроводность $\kappa_{el} + \kappa_L$ растёт быстрее.

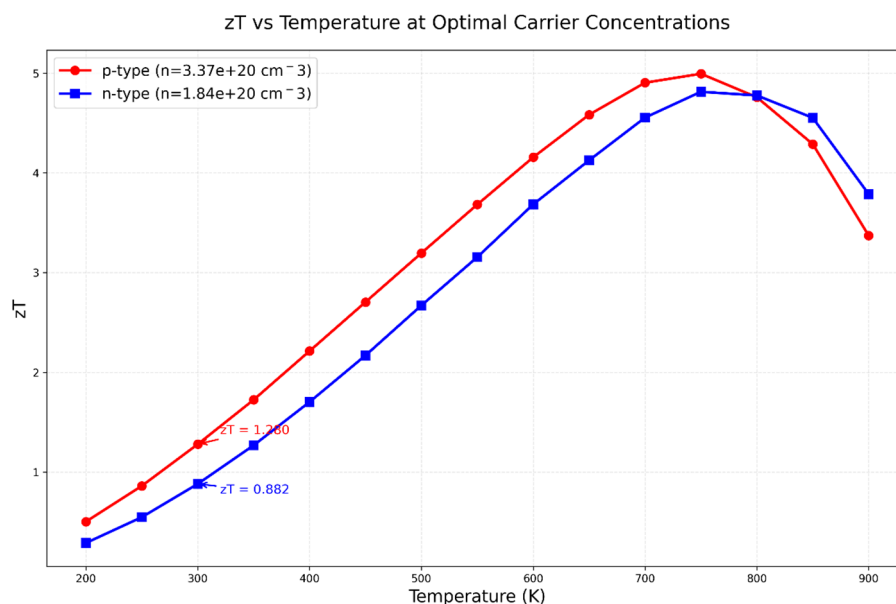


Рис. 1. Температурная зависимость коэффициента термоэлектрической добротности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № 075-00186-25-00 (вычисления равновесных свойств сплава) и Российского научного фонда, проект № 24-12-20016 (вычисления термоэлектрических свойств сплава).

- [1] W.G. Zeier et al., *Nat. Rev. Mater.*, **1** (2016) 16032.
- [2] Hangtian Zhu et al., *Nat. Comm.*, **9** (2018) 2497.
- [3] Y. Pei et al., *Energy Environ. Sci.*, **4** (2011) 2085.

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА СВОЙСТВА ТИТАНАТА БАРИЯ В ОБЛАСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

И.В. Бычков^{1,*}, Д.А. Кузьмин¹, А.П. Каманцев²

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Институт радиотехники и электроники РАН, Москва, Россия

*bychkov@csu.ru

Титанат бария (BaTiO_3) — это классический сегнетоэлектрический материал, который имеет огромное значение в современной электронной промышленности. Его уникальные свойства обусловлены особенностью кристаллической структуры. Титанат бария обладает сегнетоэлектрическими, пьезоэлектрическими, пирозэлектрическими и электрооптическими свойствами. Диэлектрическая проницаемость данного материала в точке фазового перехода может достигать 10^5 [1]. Необходимо отметить, что хотя титанат бария исследуется и применяется уже с середины прошлого века, исследования его свойств до сих пор актуальны [2,3].

Настоящая работа посвящена численному моделированию свойств титаната бария на основе термодинамической теории Ландау-Гинзбурга-Девоншира. Это самый популярный метод для моделирования сегнетоэлектриков, он основан на разложении свободной энергии в ряд по параметрам порядка (в нашем случае -спонтанной поляризации P и деформации u). Свободная энергия записывается в виде

$$F = F_0(T) + \frac{1}{2}aP^2 + \frac{1}{4}bP^4 + \frac{1}{6}cP^6 - EP + \alpha uP^2 + \frac{1}{2}ku^2 - \sigma u,$$

где $F_0(T)$ - функция от температуры T , σ — механическое напряжение, u — упругая деформация, P - поляризация, E - напряженность электрического поля, $a = a_0(T - T_0)$, b , c - постоянные в теории Ландау, T_0 - температура фазового перехода, α - постоянная электрострикции, k - упругая постоянная. Из условий равновесия можно аналитически определить относительную диэлектрическую восприимчивость

$$\chi = \left[\epsilon_0 \left[\left(a + \frac{2\alpha\sigma}{k} \right) + 3 \left(b - \frac{2\alpha^2}{k} \right) P^2 + 5cP^4 \right] \right]^{-1},$$

где ϵ_0 - электрическая постоянная.

В процессе моделирования на основе уравнений движения и уравнения Ландау-Халатникова исследуются кинетика фазового перехода, зависимости от давления поляризации, сегнетоэлектрические свойства, сдвиг температуры фазового перехода, изменение скоростей света и поперечного звука.

Моделирование титаната бария под одноосным давлением – это мощный инструмент, который позволяет не только предсказать поведение материала в экстремальных условиях, но и глубже понять фундаментальную связь между механическими и функциональными (сегнето-, пьезоэлектрическими) свойствами. Это критически важно для разработки новых устройств, таких как датчики давления и актуаторы, которые работают под механической нагрузкой.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 25-19-00942

[1] Физика сегнетоэлектриков. Современный взгляд. Лаборатория знаний, Москва 2020.

[2] V.V. Temnov, P. Vavassori, *Nat. Photon.*, **18** (2024) 529.

[3] Hoang, L.P., Pesquera, D., Hinsley, G.N. et al. *Nat Commun.*, **16** (2025) 7966.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА НА ОСНОВЕ 3-d, 4-d и 5-d МЕТАЛЛОВ

Р.Р. Гарипов^{1,*}, М.В. Матюнина¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

* ravil.garipov2209@gmail.com

Сплавы Гейслера это класс интерметаллических соединений, демонстрирующий различные функциональные свойства. Особый интерес представляет магнитокалорический эффект (МКЭ). Большая часть соединений относится к полным сплавам Гейслера с химической формулой X_2YZ с пространственной группой симметрии $Fm\bar{3}m$ (№225) [1]. В структуре $L2_1$ все четыре подрешетки в ГЦК-решётке заполнены атомами X , Y и Z (X , Y – переходные металлы разной валентности, Z – элементы главной группы). Для повсеместного внедрения технологии магнитного охлаждения сплав должен выполнять следующие условия: он должен быть механически стабилен, обладать отрицательной энергией формирования, и показывать высокий МКЭ вблизи комнатной температуры, а также выдерживать большое количество циклов нагрев-охлаждение. Среди сплавов Гейслера чаще всего используют сплавы на основе Ni_2MnGa , обладающие высоким МКЭ. На сегодняшний день ведется активный поиск материалов, удовлетворяющих этим требованиям [2]. Целью настоящей работы было исследовать структурные и магнитные свойства бинарных композиций в прямой и инверсной решётках Гейслера, состоящих из пар 3-d, 4-d и 5-d переходных металлов.

В кристаллической решётке $Fm\bar{3}m$, позиции Вайкоффа $8c$ (0,25;0,25;0,25), (0,75;0,75;0,75) занимает атом с большей валентностью, позицию $4b$ (0,5;0,5;0,5) – атом с меньшей валентностью и на $4a$ (0;0;0) позициях располагается атом из главной подгруппы. В позиции $8c$ элементы X и Y располагались в равных пропорциях. 216 группа симметрии ($C1b$) является инверсной, сплавы в этой группе могут иметь инверсную решётку, если атомный номер Y – компоненты выше, чем X – компоненты того же периода таблицы Менделеева. В позициях Вайкоффа атомы X оказываются на позиции (0;0;0) и (0,75;0,75;0,75), атомы Y занимают позиции (0,5;0,5;0,5), атомы Z имеют положения (0,25;0,25;0,25) [4]. Расчёты проводились в программном пакете VASP [3] в рамках приближения обобщённого градиента (*general gradient approximation – GGA*).

В ходе расчётов для структур $Fm\bar{3}m$ и $C1b$ групп симметрии была определена механическая стабильность сплавов, а также тип кристаллической решётки. Было рассмотрено более 800 соединений с отрицательной энергией формирования: 580 с группой симметрии №225 и 376 – 216 группы симметрии. Из 580 соединений со структурой $Fm\bar{3}m$ 194 соединения устойчивы в аустените, 220 в мартенсите и 166 – как в аустенитной, так и мартенситной фазах. В случае соединений с инверсной решеткой 111 устойчивы только в аустените, 91 – в мартенсите, и 174 в обеих фазах. Механически стабильными соединениями из рассмотренных оказалось 85% в случае соединений с 225 группой симметрии и лишь 45% для соединений с 216 группой симметрии.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 25-12-20024.

[1] В.В. Марченков, В.Ю. Ирхин, *Физика металлов и металловедение*, **122(12)** (2021) 1221.

[2] V.V. Sokolovskiy, M.V. Matunina, R.R. Garipov et al., *Phys. Met. Metallogr.*, **125** (2024) 1867.

[3] G. Kresse, J. Furthmüller, *Physical Review B*, **54** (1996) 11169.

[4] L. Wollmann, A.K. Nayak, S.S.P. Parkin, C. Felser, *Annu. Rev. Mater. Res.*, **47** (2016) 247.

ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦИИ ВЫЧИСЛЕНИЙ ФОНОННОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ

А.А. Ененко^{1,*}, В.Д. Бучельников¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*alexey.enenko@gmail.com

Термоэлектрические материалы остаются предметом научного и технического изучения и применения в промышленности и народном хозяйстве. Поиск материалов с высокими термоэлектрическими свойствами представляет собой первостепенную задачу как с точки зрения экспериментальных исследований, так и с точки зрения теоретического предсказания.

Качество термоэлектрических материалов характеризуется безразмерной термоэлектрической добротностью:

$$ZT = \frac{\sigma S^2}{(\kappa_L + \kappa_e)} T$$

Высокое значение ZT можно получить имея высокое значение проводимости и коэффициента Зеебека, что, однако, неизбежно связано и с наличием повышенной электронной составляющей теплопроводности. Другой подход состоит в поиске материалов с низкими значениями общей теплопроводности, т.е. поиск материала с низким значением фононной теплопроводности среди полупроводников и диэлектриков.

Данная работа посвящена разработке ПО для автоматизированной оценки решеточной теплопроводности различных материалов. Целью программного пакета является быстрая предварительная оценка и поиск «кандидатов» для дальнейшего детального исследования среди большого количества предполагаемых материалов. Расчет теплопроводности происходит в рамках квазидебаяевского приближения, реализованного в программном пакете «*Rymatgen*» [1]. Исходные данные для расчета получаются методами теории функционала плотности, проводимых с помощью пакета «*VASP*». ПО позволяет автоматизировать все этапы вычисления (от геометрической оптимизации ячейки до вычисления упругих свойств и построения фононного спектра), а также расчеты нескольких сплавов одновременно. Автоматизация этапов осуществляется с помощью библиотек *Fireworks* [2] и *Automate* [3].

Результатом работы пакета является получение в течение непродолжительного времени предварительных данных о зависимости фононной теплопроводности от температуры. Также в пакете доступно вычисление зонной структуры, фононного спектра и значений ZT для различных уровней плотности носителей заряда р- и n-типа.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № 075-00186-25-00 (вычисления равновесных свойств сплава) и Российского научного фонда, проект № 24-12-20016 (вычисления термоэлектрических свойств сплава).

[1] C. Toher, J.J. Plata, O. Levy, et al., *Phys. Review B*, **90** (2014) 174107.

[2] A. Jain, S. Ping Ong, W. Chen et al., *Concur. Comp.-Pract. E.*, **27(17)** (2015) 5037.

[3] K. Mathew, J.H. Montoya, A. Faghaninia et al., *Comput. Mater. Sci.*, **139** (2017) 140.

МАГНИТОСТРИКЦИЯ ОЦК И ГЦК ФАЗ СПЛАВА Fe-Ga

М.А. Загребин^{1,*}, М.В. Матюнина¹, В.В. Соколовский¹, В.Д. Бучельников¹

¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*miczag@mail.ru

Многофункциональные соединения на основе железа представляют интерес из-за их необычных механических, магнитных, электрических и магнитострикционных свойств [1]. Добавление немагнитного элемента, такого как Ga, приводит к значительному увеличению величины магнитострикции [2]. Магнитострикционная кривая сплавов Fe-Ga демонстрирует два пика магнитострикции λ_{001} при 19 ат.% и 27 ат.% содержания Ga [2]. Несмотря на 25 лет исследований, причины формирования гигантской магнитострикции, а также продолжающиеся фазовые превращения на структурном и микроструктурном уровнях, происходящие при нагреве и охлаждении в сплавах Fe-Ga, до сих пор не до конца поняты и не объяснены. В связи с этим прогнозирование возможных типов магнитного и структурного упорядочения и фазовых переходов, изучение сосуществующих равновесных и метастабильных фаз, а также причины возникновения гигантских значений магнитострикции, несомненно, являются важной фундаментальной проблемой современной физики конденсированного состояния и материаловедения. Целью данной работы является изучение влияния различных структурных состояний на магнитострикцию сплавов Fe-Ga вблизи стехиометрического состава Fe₃Ga.

Расчеты проводились с использованием пакета ab initio моделирования Vienna (VASP) [3]. Для учета эффектов обменной корреляции использовалось обобщенное градиентное приближение в формулировке Пердью, Бурка, Эрнцерхофа (Perdew, Burke and Ernzerhof – PBE) [4]. Геометрическая оптимизация и расчет энергии магнитокристаллической анизотропной энергии (E_{MCA}) были выполнены для структур $D0_3$ и $L1_2$ с 32-атомной суперячейкой. Для оценки магнитострикции использовались выражения из [5], а E_{MCA} определялась как разность энергий системы с ориентацией спина атомов Fe вдоль направлений $[001]$ и $[111]$. В результате были получены основное состояние, магнитные свойства, такие как магнитный момент, параметры магнитного обмена, температуры Кюри и константа тетрагональной магнитострикции λ_{001} сплавов Fe_{100-x}Ga_x. На рисунке 1 представлены зависимости магнитострикции от температуры и внешнего магнитного поля при комнатной температуре для структур $D0_3$ и $L1_2$ сплава Fe₇₅Ga₂₅.

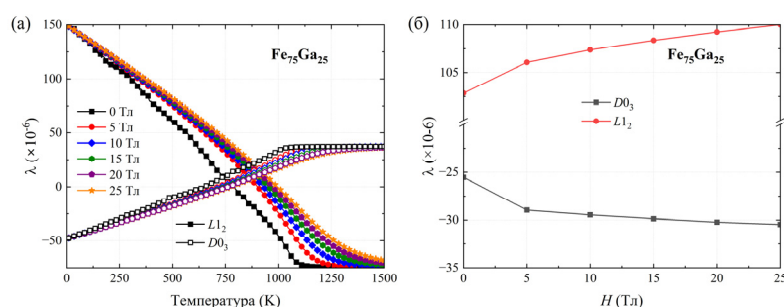


Рис. 1. Магнитострикция структур $D0_3$ и $L1_2$ сплава Fe₇₅Ga₂₅ как функция (а) температуры, (б) магнитного поля при температуре 300 К.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20086, <https://rscf.ru/project/24-22-20086/>.

- [1] G. Petculescu et al., *J. Appl. Phys.*, **105** (2009) 07A9322.
- [2] J.B. Restorff et al., *J. Appl. Phys.*, **111** (2012) 023905.
- [3] G. Kresse, J. Furthmuller, *Phys. Rev. B.*, **54** (1996) 11169.
- [5] J.P. Perdew et al., *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996) 3865.
- [6] M. Matyunina et al., *J Magn. Magn. Mater.*, **476** (2019) 120.

ПРОБЛЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ СУБРЕЛЯТИВИСТСКОГО СТОЛКНОВЕНИЯ НАНОЧАСТИЦЫ С ТВЁРДОЙ МИШЕНЬЮ

С.Н. Замоздра^{1,*}

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*sezam@csu.ru

Автоматические исследовательские космические аппараты – зонды – смогут долететь до ближайших звёзд при жизни создателей (за несколько десятков лет), имея субрелятивистскую скорость: $v/c \sim 0.1$. Согласно проекту Breakthrough Starshot [1] столь высокие скорости достижимы для световых парусников массой несколько грамм, разгоняемых массивом лазеров. Однако, сочетание малого веса и большой скорости усугубляет проблему радиационной защиты таких зондов.

Радиационное воздействие на субрелятивистские зонды оказывают не только космические лучи, но и весь набегающий поток межзвёздной среды. Особо интересны удары пылинок, создающие в твёрдой мишени полости и треки за счёт экстремальной плотности потока энергии. В моделировании таких ударов полезны наработки по инерциальному удержанию плазмы (ИУП).

Типичная межзвёздная пылинка, имея размер 5-10 нм, относится к наночастицам. Начало её столкновения с мишенью при $v/c \sim 0.1$ пока не рассматривалось. Интуитивно ясно, что ионные остовы и валентные электроны ударника и мишени смешиваются, химические связи рвутся, и ударник превращается в сверхплотный пучок из ионов и электронов. Последующие процессы – обдирка и стабилизация заряда ионов пучка, рассеяние и замедление первичных и вторичных электронов – также не изучены.

Впрочем, решено несколько задач о поздних стадиях эволюции пучка. С помощью кода SRIM рассчитаны потери энергии и пробеги ионов основных элементов межзвёздной пыли (H, C, O, Mg, Si, Fe) в мишенях из кварца и графита [2]. В работе [3] предположено, что лидирующие ионы превращают мишень в плотную плазму, поэтому учтена только её тормозная способность. Перенос излучения в плазме и её гидродинамика рассчитаны кодом HYDRA, разработанном для задач ИУП. Это позволило рассмотреть тепловую и ударную волны, расширение трека и формирование кратера.

В работах [2,3] не учитывалось, что близкое расположение (соседство) ионов в сверхплотном пучке приводит к неаддитивности потерь энергии этих ионов, вызванной интерференцией волн электронной плотности мишени в кильватерах ионов. С другой стороны, эта интерференция может нарушаться при деформациях пучка, замеченных, например, в моделях ИУП [4].

Интересна задача о неаддитивных потерях энергии исходного электронно-ионного пучка, порождённого наночастицей. При $v/c \sim 0.1$ в твёрдой мишени на глубине ~ 100 нм электронная подсистема пучка сильно расширяется и останавливается, поэтому плотность тока на оси пучка и его потери энергии резко возрастают. Возможно, этот эффект создаёт дополнительный пик потерь энергии помимо пика Брэгга.

Весьма полное численное моделирование субрелятивистского столкновения наночастицы с твёрдой мишенью возможно с помощью метода частиц в ячейках. Современные реализации этого метода адаптированы для моделей конденсированного состояния, например, через решатели уравнения Больцмана-Уэлинга-Уленбека (см. [4]). Однако, часть вышеуказанных процессов и эффектов можно изучать в рамках диэлектрического формализма, о чём и будет доклад.

[1] K.L.G. Parkin, *Acta Astronautica*, **152** (2018) 370.

[2] T. Hoang, A. Lazarian, B. Burkhart, A. Loeb, *Astrophys. J.*, **837** (2017) 5.

[3] J.T. Early, R.A. London, *J. Brit. Interplanet. Soc.*, **71** (2018) 133.

[4] Z.P. Fu, Z.W. Zhang, K. Lin, D. Wu, J. Zhang, *Physics of Plasmas*, **30** (2023) id.072708.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОЙ СТАБИЛЬНОСТИ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА НА ОСНОВЕ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Д.Е. Кириллов^{1,*}, М.В. Матюнина¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*den4862@yandex.ru

Большинство традиционных материалов, проявляющих значительный магнитокалорический эффект, обладают такими недостатками, как хрупкость и ухудшение магнитных свойств при многократных циклах нагрева и охлаждения. Эти проблемы ограничивают их эффективность и применимость в реальных охлаждающих системах, где материалы должны демонстрировать надежную работу в течение нескольких тысяч циклов. Однако, сплавы Гейслера на основе переходных металлов, такие как $\text{Ni}_{2-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{1.25}\text{Ti}_{0.75}$ [1], показывают хорошие результаты в решении этой проблемы. Цель исследования заключалась в изучении фазовой стабильности сплавов Гейслера, состоящих из $3d$, $4d$ и $5d$ переходных металлов. Отличием от «классической» формулы X_2YZ [2] стало расположение атомов в решётке. Так в кристаллической решётке $Fm\bar{3}m$, позиции Вайкофа $8c$ (0,25;0,25;0,25), (0,75;0,75;0,75) занимает атом с большей валентностью, позицию $4b$ (0,5;0,5;0,5) – атом с меньшей валентностью и на $4a$ (0;0;0) позициях располагается атом из главной подгруппы. В нашем случае в эквивалентной позиции $8c$ располагались X и Y элементы в равных пропорциях. Расчёты проводились в программном пакете VASP в рамках приближения обобщённого градиента [3].

Всего было проанализировано 296 сплавов различного состава. Около 53% исследованных сплавов имеют отрицательные значения энергии формирования, что указывает на их термодинамическую устойчивость. Наблюдается четкая корреляция между знаком энергии формирования и элементарным составом: системы с участием тугоплавких $5d$ -элементов чаще демонстрируют положительные значения энергии формирования, тогда как соединения на основе $3d$ -металлов преимущественно стабильны. Рисунок 1 демонстрирует зависимость энергии формирования от выбора переходных металлов для аустенитной и мартенситной фаз. В качестве примера выбрана группа сплавов, где элементы X и Z меняются, а элемент Y фиксирован (никель). Наибольшая стабильность наблюдается у сплава Sc_2NiPt в мартенситной фазе, $E_f = -0,81 \frac{\text{эВ}}{\text{атом}}$.

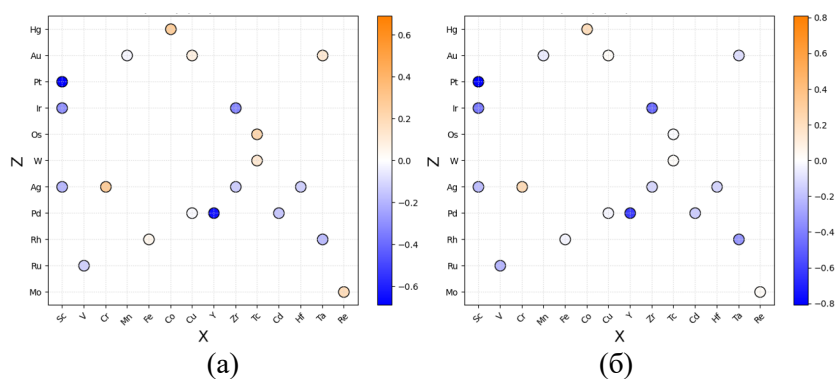


Рис. 1. Зависимость энергии формирования от элемента ($\frac{\text{эВ}}{\text{атом}}$). (а) Аустенитная фаза, (б) мартенситная фаза

Работа выполнена при поддержке проекта Российского научного фонда № 25-19-20141 (<https://rscf.ru/ru/project/25-19-20141/>).

- [1] V.V. Sokolovskiy, M.V. Matunina, R.R. Garipov et al., *Phys. Met. Metallogr.*, **125** (2024) 1867.
- [2] В.В. Марченков, В.Ю. Ирхин, *Физика металлов и металловедение*, **122(12)** (2021) 1221.
- [3] G. Kresse, J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, **54** (1996) 11169.

ДИНАМИКА ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ЦЕПОЧКАХ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ С УЧЁТОМ ДИССИПАЦИИ

Д.А. Кузьмин^{1,*}, И.В. Бычков¹, Е.Г. Екомасов², И.Ф. Шарафуллин²

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

*kuzminda@csu.ru

В работе приведены результаты исследования динамики, времени жизни и механизмов распада дискретных бризеров (ДБ) в одномерных цепочках магнитных наночастиц с учётом диссипативных эффектов. Моделирование выполнено на основе численного решения уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта, описывающего динамику намагниченности с учётом диссипации (затухания Гильберта). Рассматривается цепочка эллипсоидальных однодоменных наночастиц из пермаллоя, взаимодействующих посредством диполь-дипольного взаимодействия. Для анализа использовался численный метод Рунге-Кутты 5-го порядка.

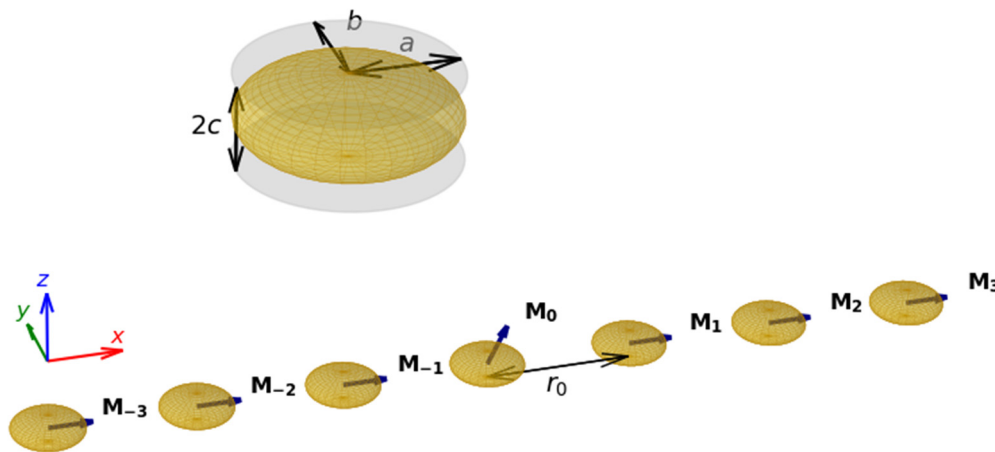


Рис. 1. Цепочка эллипсоидальных магнитных наночастиц.

В результате исследования обнаружено, что учёт диссипации принципиально меняет динамику ДБ. В отличие от консервативных моделей, ДБ имеют конечное время жизни. В процессе распада частота их колебаний уменьшается, а энергия локализованного возбуждения преобразуется в излучение спиновых волн в цепочку. Показано, что уменьшение расстояния между частицами (усиление диполь-дипольной связи) значительно сокращает время жизни ДБ и увеличивает частоту испускаемых спиновых волновых пакетов. Распад ДБ трансформирует их в источник направленных спиновых волновых пакетов. Показано, что скорость этого пакета (групповая скорость) зависит от расстояния между частицами и имеет четкий минимум при определённом значении (~ 120 нм), что не наблюдалось в моделях без диссипации. ДБ демонстрируют устойчивость как при увеличении количества возбуждённых частиц в ядре (до 5 частиц), так и при изменении общей длины цепочки (от 10 до 50 частиц).

Диссипация не просто подавляет ДБ, но и позволяет управляемо генерировать с их помощью спиновые волновые пакеты с контролируемой скоростью. Обсуждаются возможные методы возбуждения ДБ в эксперименте: с помощью сверхбыстрого оптического перемагничивания, спинового момента или резонансного СВЧ-воздействия. Полученные результаты открывают новые перспективы для применения нелинейной динамики магнитных наночастиц в магнотронике и спинтронике, например, для создания магнотронных переключателей или источников спиновых волн на основе управляемого распада локализованных возбуждений.

ДЕФЕКТЫ В ДИХАЛЬКОГЕНИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ

Р.М. Латыпов^{1,*}, В.П. Бескачко¹

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

*latypovrm@susu.ru

С момента обнаружения однофотонного излучения в WSe₂ в 2015 году [1], дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) активно исследуются на предмет использования в устройствах квантовой информатики и нанoeлектроники. Такие материалы, благодаря структурным и физическим свойствам, возможно непосредственно интегрировать с периферийными компонентами интегральных схем – резонаторами и волноводами. Способность к генерации одиночных фотонов (ОФ) возникает в данных материалах из-за локальных напряжений и/или дефектов решетки, точная идентификация которых является предметом исследований [2], проводимых в том числе и методами компьютерного моделирования. В частности, в работе [3] были исследованы размерные эффекты в гексагональном нитриде бора (h-BN), родственном по классу материалу, выявившие роль взаимодействия между дефектами в формировании дискретной энергетической структуры в запрещенной зоне h-BN. Эта зависимость дает дополнительную возможность для настройки параметров источника ОФ. В связи с этим целесообразно рассмотреть ДПМ, где способность к генерации ОФ была уже обнаружена экспериментально, как, например, в WS₂, MoS₂ и MoTe₂ [4,5].

В данной работе проведено моделирование монослоев упомянутых выше ДПМ в рамках теории функционала электронной плотности, реализованной в пакете VASP, в приближении обобщенных градиентов для обменно-корреляционного функционала. Рассчитанные свойства бездефектных материалов согласуются с опытными данными в пределах ~1% для структурных параметров и ~9% для ширины запрещенной зоны. Отметим довольно низкое отклонение в определении ширины запрещенной зоны для данного функционала со стандартной погрешностью в 40% [6]. Незначительные отклонения отмеченных характеристик от литературных данных сподвигли нас на моделирование дефектных структур ДПМ. Конкретно, они были исследованы на предмет их равновесных конфигураций, зонной структуры, энергии образования дефектов, и зависимости данных характеристик от расстояния между дефектами. Перечислим полученные результаты моделирования WS₂. Примеси молибдена практически не деформируют длины связей в решетке, что ожидаемо ввиду незначительного отличия параметров решетки у MoS₂ и WS₂. Только определенные дефекты порождают дискретные уровни в запрещенной зоне, такие как вакансии серы и примеси хрома. Примеси молибдена и кислорода уменьшают ширину запрещенной зоны, однако при больших расстояниях между дефектами (8 параметров трансляции решетки), уменьшение нивелируется до уровня погрешности в определении энергии. У кислородных дефектов наименьшая энергия образования, а у точечных дефектов отсутствует зависимость энергии образования от расстояния между дефектами. Энергии образования вакансии серы в WS₂ и MoS₂ отличаются в пределах погрешности определения энергии.

[1] C. Chakraborty et al., *Nat. Nanotechnol.* **10** (2015) 507.

[2] M. Turunen et al., *Nat. Rev. Phys.* **4** (2022) 219.

[3] R. M. Latypov et al., *J. of Surf. Inv.: X-ray, Synch. and Neut. Tech.* **18** (2024) 63.

[4] C. Palacios-Berraquero et al., *Nat. comm.*, **7** (2016) 12978.

[5] H. Zhao, et al. *Nat. comm.*, **12** (2021) 6753.

[6] P. Borlido et al., *J. of Ch. Th. and Comp.* **15** (2019) 5069.

ВЛИЯНИЕ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ПОПРАВК К ЭНЕРГИИ НА ДИНАМИКУ СВЯЗАННЫХ ВИХРЕЙ В СПИН-ТРАНСФЕРНЫХ НАНООСЦИЛЛЯТОРАХ

Т.А. Лукошкина^{1,*}, Д.Ф. Нерадовский¹

¹ Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

*tamara_lukos@mail.ru

Рассматривается динамика вихрей в трёхслойном двухвихревом спин-трансферном наноосцилляторе (СТНО). Для описания гиротропного движения вихрей используются уравнения Тиля [1], полученные на основе метода коллективных переменных для гироскопической динамики вихрей в нанодиске. Энергия этой системы в приближении парного взаимодействия записывается с учётом ангармонических поправок для квазиупругой энергии вихрей.

Полученная система для описания динамики системы двух магнитных вихрей в СТНО представляет собой проекции на декартову систему координат радиус-векторов и их производных по времени ($\vec{r}_i = (x_i, y_i, 0)$, $\dot{\vec{r}}_i = (\dot{x}_i, \dot{y}_i, 0)$) ядер вихрей, где индекс $i = 1, 2$ соответствует номеру вихря.

Эффективно динамические уравнения для подобных систем решаются численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка. Применимость данного метода была показана путём сопоставления численного и аналитического решений для невозмущённой (линейной) системы. Для качественной оценки влияния ангармонических поправок было проведено дискретное преобразование Фурье на языке программирования Python. Невозмущённая система обладает двумя гармониками, что отвечает аналитическому решению. Показано, что учёт нелинейных слагаемых в энергии СТНО приводит к появлению дополнительных гармоник по сравнению с линейным случаем (Рис. 1). В качестве примера приведён случай для первого вихря, когда ангармонический коэффициент κ составляет 20% от коэффициента квазиупругости k . Основные гармоники (с наибольшими амплитудами) при этом соответствуют линейному (невозмущённому) случаю.

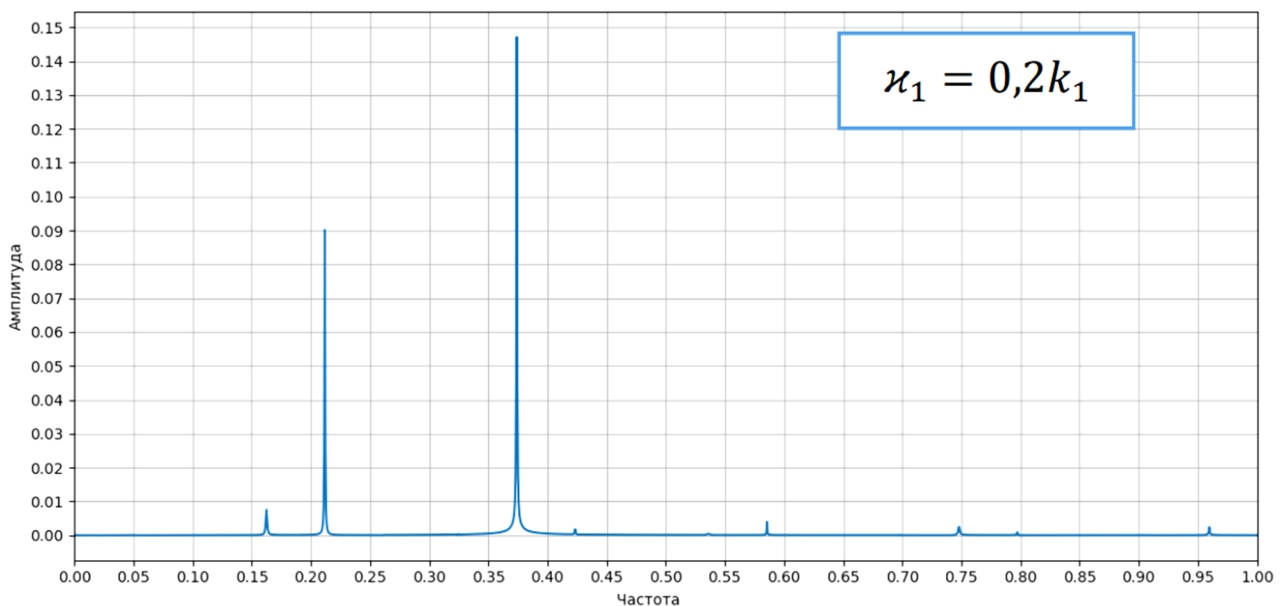


Рис. 1. Результат применения дискретного преобразования Фурье для x -компоненты радиус-вектора ядра первого вихря.

[1] A.A. Thiele, *Phys. Rev. Lett.*, **30** (1973) 230.

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ Fe_2CrSe_4

М.В. Мамонова¹, К.С. Кондрашова^{1,*}

Омский государственный университет имени Ф.М. Достоевского, Омск, Россия
kkondrasova952@gmail.com

Среди халькогенидов переходных металлов соединение Fe_3Se_4 рассматривается как перспективная основа для создания постоянных магнитов, не содержащих редкоземельных элементов. Замена железа хромом в $\text{Fe}_{3-x}\text{Cr}_x\text{Se}_4$ приводит к значительным изменениям магнитных и транспортных свойств. Соединение Fe_2CrSe_4 обладает большим коэрцитивным полем (полуширина петли гистерезиса достигает 15 КЭ при 2 К) и значительным эффектом обменного смещения при температуре ниже 50 К. Предполагается, что обменное смещение в Fe_2CrSe_4 является результатом присутствия областей (кластеров) с короткодействующими корреляциями в ферромагнитной матрице из-за неоднородного распределения атомов железа и хрома по решетке [1]. В работе [1] были исследованы поликристаллический образец Fe_2CrSe_4 , синтезированный в виде кристалла. Кристаллическая структура образца была уточнена в моноклинной сингонии с использованием двух моделей, представленных на рисунке 1 (модель I - пространственная группа I_2/m) и модель II - пространственная группа $B2$. Атомы переходных металлов ($M = \text{Fe}$ или Cr) в Fe_2CrSe_4 расположены внутри октаэдров $M_1\text{-Se}_6$ и $M_2\text{-Se}_6$, образованных шестью атомами Se, в полных слоях (M_1) и в слоях с вакансиями (M_2). Параметры системы для первой модели: $a = 6,216 \text{ \AA}$; $b = 3,568 \text{ \AA}$; $c = 11,511 \text{ \AA}$; $\beta = 91,35^\circ$; $\gamma = 90,0^\circ$; для второй модели: $a = 12,951 \text{ \AA}$; $b = 6,215 \text{ \AA}$; $c = 3,567 \text{ \AA}$; $\beta = 90,0^\circ$; $\gamma = 117,32^\circ$. Цель данной работы в рамках первопринципного подхода метода функционала плотности проверить, какая из двух представленных моделей соединения будет наиболее энергетически выгодной. Расчеты проводились с использованием программного пакета VASP [2].

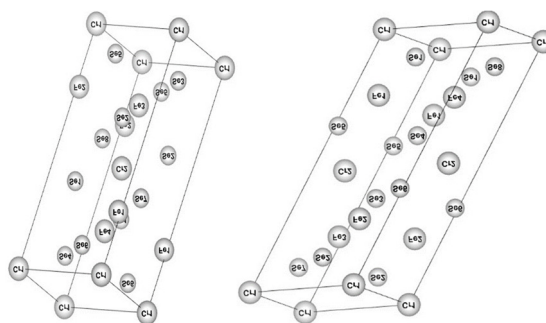


Рис. 1. Слева изображена модель I, справа - модель II

В таблице 1 представлены значения полной энергии суперъядейки для двух вариантов расчетов: без оптимизации, т.е. при изменении положения атомов с сохранением формы и размера ячейки, и с оптимизацией, т.е. с изменением формы и размера ячейки. Расчеты проводились с учетом коллинеарного магнетизма с направлением намагниченности для всех атомов вдоль оси Oz . Рассчитанные значения магнитного момента каждого атома и суммарного магнитного момента также приведены в таблице 1.

Табл.1. Результаты расчета энергии и магнитных характеристик двух моделей структуры Fe_2CrSe_4

	Модель 1	Модель 1 с оптимизацией.	Модель 2	Модель 2 с оптимизацией.
Полная энергия, эВ	-83.98771944	-84.03725118	-83.87199127	-84.04221298
Полная намагниченность, μ_B	14.224	13.052	14.955	12.686
Момент атома Cr	3.077	2.993	3.132	3.012
Момент атома Fe	2.154	1.899	2.311	1.804
Момент атома Se1	-0.068	-0.060	-0.065	-0.076
Момент атома Se2	-0.069	-0.072	-0.073	-0.063

Исходя из полученных результатов можно сделать вывод, что более энергетически выгодной будет модель II с оптимизацией. Однако близкие значения полной энергии подтверждают возможность реализации обеих моделей.

[1] V.A. Komarova et al., *J. Magn. Magn. Mater.*, **588** (2023) 171511.

[2] G. Kresse, J. Furthmuller, *Phys. Rev. B.*, **54** (1996) 11169.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЛАЗЕРНОЙ УДАРНОЙ ОБРАБОТКИ МЕДИ НА ОСНОВЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

К.Д. Манухина^{1,*}, В.В. Погорелко², А.Е. Майер², О.А. Плехов¹

¹ Институт механики сплошных сред Уральского отделения РАН, Пермь

² Челябинский Государственный Университет, Челябинск

*ksmanuhina15@gmail.com

В настоящее время активно разрабатывается метод лазерной ударной обработки (ЛУО) для упрочнения металлов и сплавов [1, 2]. Этот метод заключается в формировании поля остаточных напряжений путем высокоомощного короткоимпульсного лазерного воздействия и генерации в материале упругопластической волны, что позволяет использовать это явление для увеличения срока службы материалов и изделий.

В работе проведено численное моделирование процесса распространения ударной волны в меди, вызванной импульсной нагрузкой, соответствующей лазерному облучению. Разработана одномерная модель, которая рассчитывает динамику распространения УВ и позволяет определить степень пластической деформации, скорость свободной поверхности и распределение остаточных напряжений по глубине. Воздействие лазерного облучения задается профилем давления, полученным из ранее предложенной широкодиапазонной модели ЛУО [3]. Для описания зависимостей напряжений от пластических деформаций используется модель Джонсона-Кука (ДК) [4]. По сравнению с широкодиапазонной моделью [3], предложенная модель требует меньше вычислительных ресурсов, но рассматривает процессы только в «холодной» части металла.

Для калибровки параметров модели ДК используется метод Байеса, заключающийся в случайном переборе параметров и оценке соответствия модельных профилей экспериментальным профилям скорости свободной поверхности [3]. Показано, что модель ДК корректно описывает состояния системы в процессе ЛУО. Проведено сравнение экспериментальных кривых с моделями ЛУО на основе модели пластичности ДК и модели дислокационной пластичности [3].

Для исследования влияния параметров ЛУО на формирование остаточных напряжений в материале была обучена искусственная нейронная сеть прямого распространения для определения профиля давления на облучаемой поверхности в широком диапазоне плотностей энергии и длительности лазерного облучения. База данных для обучения нейросетевой модели генерировалась при помощи широкодиапазонной модели ЛУП [3]. С помощью сгенерированных нейросетью профилей давления и модели ДК были посчитаны распределения остаточных напряжений, которые позволяют определить оптимальные параметры облучения при ЛУО для обеспечения необходимых сжимающих напряжений по глубине.

Разработка и обучение нейросетевой модели для получения профиля давления при лазерном облучении в широком диапазоне плотности энергии и длительности импульса выполнены в рамках проекта, поддержанного Российским Научным Фондом (проект № 24-19-00684, <https://rscf.ru/project/24-19-00684/>)

[1] N. Kashaev, S. Keller, P. Staron et al., *Fatigue Fract Eng Mater Struct.*, **44** (2021) 3463.

[2] A.H. Clauer, *Metals*, (2019) 626.

[3] A.E. Mayer, A.N. Vshivkov, O.A. Plekhov et al., *J. Appl. Phys.*, **137** (2025) 065901.

[4] W. Shen, F. Xue, *Mater. Today Commun.*, **37** (2023) 106982.

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СВЕРХПРОВОДНИКА $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

М.В. Матюнина^{1,*}, В.В. Соколовский¹, В.В. Коледов^{1,2}, В.Д. Бучельников¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Институт радиотехники и электроники им. Котельникова РАН, Москва, Россия

*matunins.fam@mail.ru

Ключевыми задачами в области высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) являются повышение критической сверхпроводящего перехода (T_c) и повышение критической плотности тока (J_c). Современные исследования в области ВТСП следуют двум основным направлениям. Первое — это продолжение изучения физико-химических основ явления сверхпроводимости в гидридах лантана [1-3], которые демонстрируют $T_c = 260$ К при приложении давления 200 ГПа и температуре 250[2]. Второе направление — это целенаправленный поиск новых ВТСП материалов и исследование их свойств. В данной работе в рамках теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP [4], с учетом обменно-корреляционных взаимодействий в приближениях SCAN и GGA-PBE, исследовано влияние гидростатического давления на структурные и электронные свойства сплава $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. На рис. 1 показано, что с увеличением давления объем 13-атомной орторомбической ($Pmmm$) расчетной ячейки уменьшается. Металлическое поведение профилей плотности электронных состояний сохраняется в области давлений от 0 до 20 ГПа за счет вкладов e_g орбиталей атомов меди, локализованной в плоскости CuO_2 .

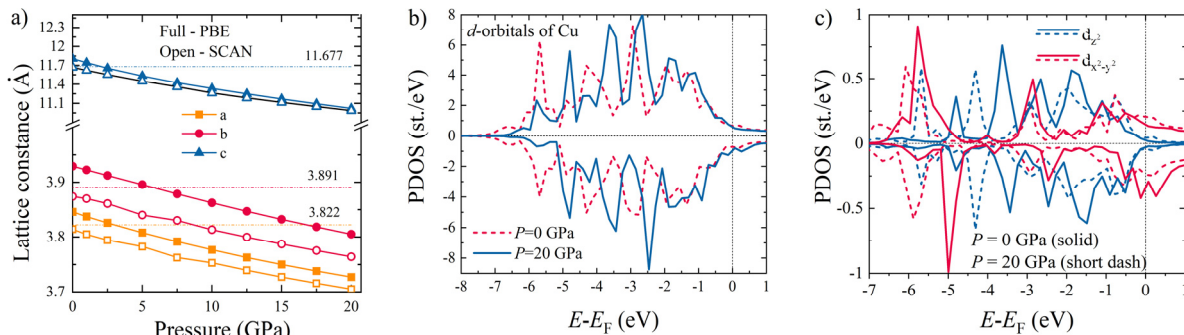


Рис. 1. а) Зависимость равновесных параметров решетки от приложенного гидростатического давления в сплаве $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Экспериментальные данные приведены из [5]. Парциальные плотности состояний б) суммарного вклада d орбиталей атомов меди и в) вклад e_g орбиталей атомов меди, расположенной в плоскости CuO_2 .

Работа выполнена при поддержке проекта Российского научного фонда № 25-19-20141 (<https://rscf.ru/ru/project/25-19-20141/>).

- [1] I. Errea, F. Belli, L. Monacelli, et al., *Nature*, **578** (2020) 66.
- [2] A. P. Drozdov, P. P. Kong, V. S. Minkov et al., *Nature*, **569** (2019) 528.
- [3] M. Somayazulu, M. Ahart, A.K. Mishra, et al., *Phys. Rev. Lett.*, **122** (2019) 027001.
- [4] G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B.*, **54** (1996) 11169.
- [5] R. J. Cava, B. Batlogg et al., *Nature*, **329**(1987) 423.

БЫСТРЫЙ ПОДХОД ОПИСАНИЯ МАГНИТНЫХ И МАГНИТОСТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА НА ОСНОВЕ $\text{Ni}_{51-x}\text{Mn}_{33,4}\text{In}_{15,6}\text{V}_x$ ($x = 0 \dots 1$)

Е.В. Морозов^{1,*}, А.В. Головчан²

¹ Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия

² Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, Россия

*evgvmorozov@gmail.com

В последние годы опубликовано множество работ, посвященных твердофазным фазовым переходам (ФП) в интерметаллических сплавах [1].

Особенности процессов в системах с двумя и более ФП являются центральной задачей работы. Целью работы является создание быстрого теоретического подхода, описывающего магнитные, структурные и магнитоструктурные фазовые переходы. Метод основан на аналитическом расчете структурных, магнитных и магнитоструктурных коэффициентов разложения термодинамического потенциала Ландау по структурному и магнитному параметрам порядка до четвертой степени с последующим построением зависимостей в полном температурном диапазоне, включающим все фазовые переходы и фазы. Для исследований использовались сплавы семейства Гейслера $\text{Ni}_{51-x}\text{Mn}_{33,4}\text{In}_{15,6}\text{V}_x$ ($x = 0 \dots 1$).

На рис. 1 представлены графики зависимостей намагниченности от температуры в различных магнитных полях для сплава $\text{Ni}_{51-x}\text{Mn}_{33,4}\text{In}_{15,6}\text{V}_x$ ($x = 0,5$). Отчетливо выражены магнитоструктурный фазовый переход и переход в точке Кюри. Анализ уравнений состояния и испытаний на устойчивость позволяет найти коэффициенты (в том числе магнитоупругие) в функции свободной энергии с параметрами порядка деформации и намагничивания, а также повторить полевые и температурные экспериментальные зависимости, используя предлагаемый быстрый подход.

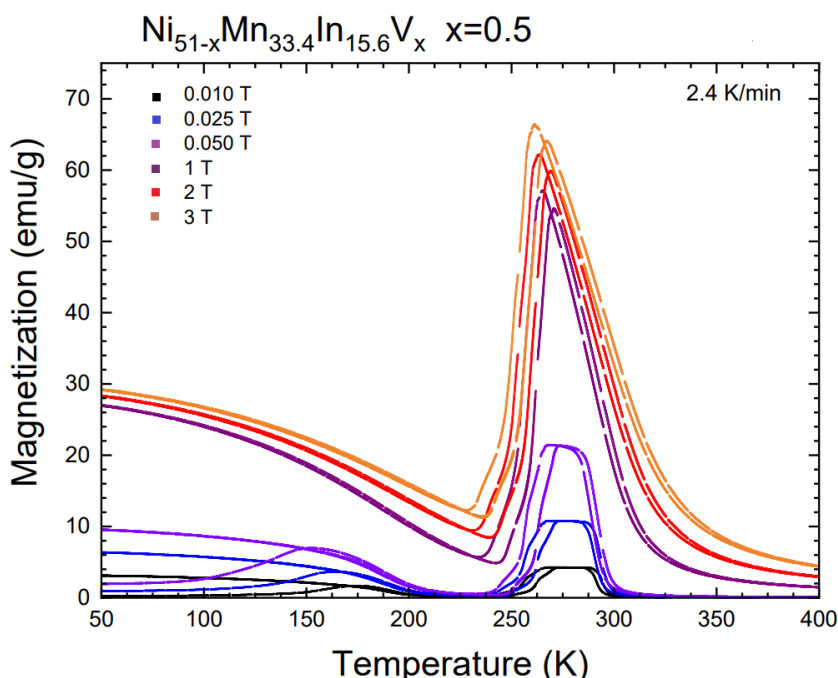


Рис.1. Температурные зависимости намагниченности при различных внешних магнитных полях

Исследования поддержаны грантом РФФ. № 25-19-00942, <https://rscf.ru/project/25-19-00942/>.

[1] F. Zhang, J. Wang, Z. Wu, et al. *Acta. Mater.*, **265** (2024) 119595.

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ ДЕКОРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА РЕШЕТКЕ КАГОМЕ

В.А. Мутайламов^{1,*}, А.К. Муртазаев¹

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

*vadim.mut@mail.ru

С использованием методов вычислительной физики исследовано основное состояние декорированной модели Изинга на решетке КагOME при различных соотношениях декорированного и узловых обменных взаимодействий. В модели учитывается обменное взаимодействие J_1 между ближайшими узловыми соседями и обменное взаимодействие J_2 между следующими за ближайшими узловыми соседями. Также учитывается обменное взаимодействие J_d узловых спинов с ближайшими декорированными спинами, расположенными между узлами решетки (декорированные соседи). Декорированные спины между собой не взаимодействуют. Гамильтониан исследованной модели имеет вид

$$H = -\frac{1}{2}J_1 \sum_{i,j} S_i S_j - \frac{1}{2}J_2 \sum_{k,l} S_k S_l - \frac{1}{2}J_d \sum_{m,n} S_m S_n,$$

где S_i – изинговский спин в узле решетки i . Структура решетки приведена на рис. 1.

Для всех возможных соотношений обменных взаимодействий определены конфигурации основного состояния и рассчитаны диапазоны их существования. Полученные результаты показали, что конфигурация основного состояния исследуемой модели зависит от соотношения обменного взаимодействия узловых спинов с декорированными и соотношения обменных взаимодействий узловых спинов между собой. Диапазоны существования конфигураций определяются величиной и знаком декорированного обменного взаимодействия, а в некоторых случаях дополнительно и величиной и знаком узлового обменного взаимодействия со вторыми соседями. Для всех конфигураций вычислены значения энергии основного состояния и рассчитана их зависимость от величины обменных взаимодействий.

Одним из ключевых последствий добавления декорированных спинов является появление фрустрационных эффектов, которые приводят к вырождению основного состояния. Вырождение возникает в результате конкуренции между различными типами обменных взаимодействий, что препятствует формированию единственной энергетически выгодной конфигурации основного состояния. Кроме того, декорирование может приводить к возникновению ферромагнетизма. Появление новых конфигураций основного состояния закономерно сопровождается формированием новых магнитных фаз, что может приводить к изменению фазовых диаграмм модели и к появлению новых линий фазовых переходов.

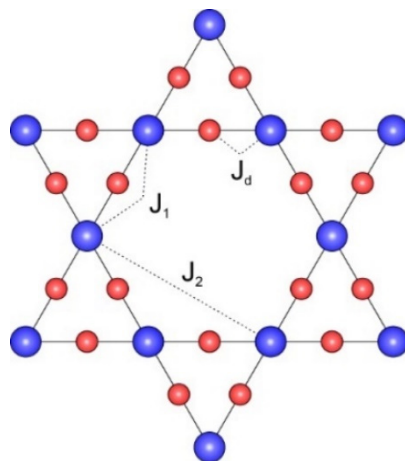


Рис. 1. Декорированная модель Изинга на решетке КагOME. Синим цветом обозначены узловые спины, красным – декорированные

ДИАГРАММЫ СОСТОЯНИЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ КОМПОЗИЦИЙ СПЛАВОВ Ni-Co-Mn-Ti

Д.В. Новокрещенов^{1,*}, В.В. Соколовский¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*mavarleyne.chelgu@ya.ru

Известно, что сплавы Гейслера способны значительно менять свои свойства при изменении их структуры или при добавлении примесей. Перспективность исследования различных многокомпонентных композиций обусловлена большим разнообразием возможных комбинаций элементов, из которых могут состоять сплавы Гейслера, их механическими свойствами и способностью проявлять магнетокалорический эффект и эффект памяти формы. Данная работа посвящена систематическому изучению системы сплавов Гейслера на основе Ni-Co-Mn-Ti. Расчёты проведены в программно-вычислительном пакете VASP [1] с использованием обменно-корреляционного потенциала, построенного по методике PAW-PBE [2] в рамках обобщённого градиентного приближения (GGA). На рис. 1 представлены тройные диаграммы, отображающие разницу магнитных моментов между мартенситной и аустенитной фазой для граней четырёхкомпонентной фазовой диаграммы. Данные диаграммы демонстрируют, что наибольшая разница достигается при малой доле титана. Увеличение доли кобальта почти всегда приводит к увеличению разности магнитных моментов, в то время как марганец ведёт себя непостоянно и в разных сечениях изменение доли марганца приводит к неодинаковому изменению разницы магнитных моментов аустенитной и мартенситной фаз. Доля никеля оказывает наименьшее влияние на эту величину. В ходе исследования были получены тройные диаграммы распределения параметров основного состояния, распределение энергии формирования аустенитных и мартенситных фаз. Определены магнитные характеристики.

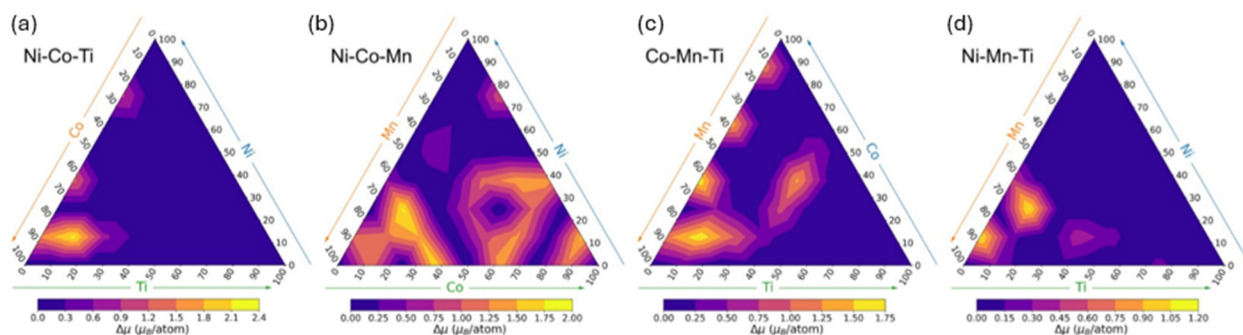


Рис. 1. Разность между магнитными моментами аустенитной и мартенситной фаз сплава Ni-Co-Mn-Ti для различных сечений четырёхкомпонентной фазовой диаграммы

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 25-12-20024.

[1] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, **54** (1996) 11169.

[2] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996) 3865.

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВА La-Fe-Si: ИССЛЕДОВАНИЯ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

М.А. Обамби¹, М.А. Загребин^{1,*}, В.Д. Бучельников¹, Д.Ю. Карпенков²

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Университет науки и технологий МИСИС, Москва, Россия

*miczag@csu.ru

Магнитные интерметаллические сплавы системы La-Fe-Si, а именно соединения типа $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$, являются самыми популярными соединениями, демонстрирующими метамгнитный фазовый переход (ФП) первого рода из ферромагнитного состояния. Эти соединения широко исследуют из-за обнаруженного в них значительного магнитокалорического эффекта (МКЭ), который в некоторых составах наблюдается вблизи комнатной температуры [1, 2]. Достоинством данного семейства сплавов также является возможность различными способами изменять температуру Кюри в широком диапазоне температур. Исследования сплавов системы $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$ под давлением показали сильную барическую зависимость температуры магнитного ФП [3], что позволяет варьировать данную температуру при сохранении значительной величины МКЭ [3]. В рассматриваемом семействе соединений можно отметить один из важных параметров – критическое давление. Критическое давление – давление, при котором температура ФП из ферромагнитного состояния в парамагнитное равняется 0 К. При этом становится невозможным индуцировать при помощи магнитного поля метамгнитный переход. Экспериментальные исследования показывают, что величина критического давления для системы $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$ находится в диапазоне 1.3-1.4 ГПа. Таким образом, целью данной работы является исследование методами теории функционала плотности основного магнитного состояния и магнитных свойств сплава $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$ в зависимости от приложенного давления.

Исследования основного состояния проводятся с помощью теории функционала плотности, реализованного в программных пакетах VASP [4, 5] и SPR-KKR [6]. На первом этапе проведена геометрическая оптимизация кристаллической структуры с учетом приложенных давлений 0, 1, 1.3, 1.4, 1.5 и 1.8 ГПа. Для расчетов использовалась структура NaZn_{13} (группа симметрии №226), в качестве прототипа, реализованная с помощью суперячейки из 28 атомов. Полученные параметры кристаллической решетки далее были использованы для вычисления параметров магнитного обменного взаимодействия с помощью пакета SPR-KKR. Во всех расчетах для обменно-корреляционного потенциала использовалось обобщенное градиентное приближение в формулировке PBE [7]. В результате вычислений получены энергии основного состояния, полные и парциальные магнитные моменты, а также параметры магнитного обменного взаимодействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № 075-00186-25-00.

- [1] S. Fujieda et al., *Appl. Phys. Lett.*, **81** (2002) 1276.
- [2] А.П. Каманцев и др., *Физика металлов и металловедение*, **124** (2023) 1074.
- [3] L. Jia et al., *Appl. Phys. Lett.* **92** (2008) 101 904.
- [4] G. Kresse, J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, **54** (1996) 11169.
- [5] G. Kresse, D. Joubert, *Phys. Rev. B.*, **59** (1999) 1758.
- [6] H. Ebert et al., *Rep. Prog. Phys.*, **74** (2011) 096501.
- [7] J.P. Perdew et al., *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996) 3865.

АВТОИНТЕРКАЛИРОВАННЫЕ ГРАФИНОВЫЕ СЛОИ: ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ

В.В. Павлик^{1,*}, В.А. Грешняков¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*vitaliypavlik@mail.ru

Графиновые слои относятся к группе квазидвумерных углеродных наноструктур и состоят из sp^2 - и sp -гибридизированных атомов [1]. Взаимопроникающие (автоинтеркалированные) графитовые слои могут образовывать трехмерные углеродные фазы с высокой пористостью [2]. Структура и электронные свойства наиболее устойчивой фазы, состоящей из слоев α -графита-1, были исследованы в работе [3]. Автоинтеркалированная фаза, структура которой была рассчитана в работе [3] в рамках приближения локальной плотности метода теории функционала плотности, состоит из волнообразно деформированных слоев и является проводником. В данной работе проведено уточнение структуры и электронных свойств трехмерной фазы из взаимопроникающих слоев α -графита-1 при использовании обменно-корреляционного функционала vdW-DF, позволяющего корректно учесть дисперсионные взаимодействия, влияние которых в рамках приближения локальной плотности недооценено.

В результате первопринципных расчетов установлено, что трехмерная фаза состоит из плоских слоев и имеет тетрагональную элементарную ячейку, что согласуется с результатами работы [2], в которой дисперсионные взаимодействия учитывались введением поправки к энергии, найденной методом теории функционала плотности. Энергия фазы ниже энергии изолированных слоев α -графита-1 на 0.04 эВ/атом и выше энергии экспериментально получаемой графитоподобной фазы из слоев γ 1-графита-2 на 0.16 эВ/атом. Диаметры каналов в структуре фазы приблизительно равны 6 Å. Плотности электронных состояний фазы из плоских и волнообразно изогнутых слоев отличаются незначительно, в обоих отсутствует запрещенная зона (рис.1). Следовательно, углеродная фаза из плоских взаимопроникающих слоев α -графита-1 является проводником.

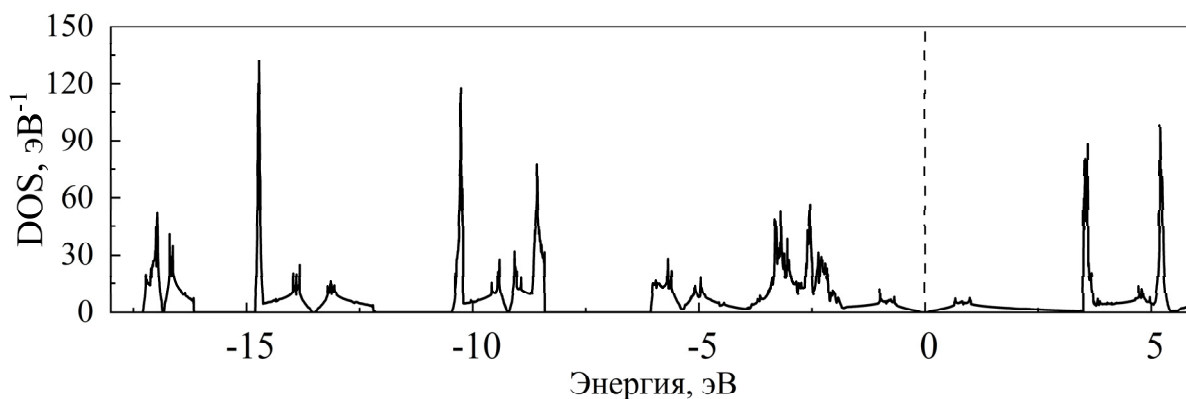


Рис. 1. Плотность электронных состояний кристалла из автоинтеркалированных слоев α -графита-1

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № 075-00186-25-00.

[1] Е.А. Беленков, В.А. Грешняков, *Физика твердого тела*, **55** (2013) 1640.

[2] В.А. Грешняков, В.В. Павлик, *Челябинский физико-математический журнал*, **10** (2025) 147.

[3] V.A. Greshnyakov, V.V. Pavlik, *Lett. Mater.*, **13** (2023) 323.

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ La-Sr-Mn-X-O_3

О.О. Павлухина^{1,*}, М.В. Матюнина¹, В.В. Соколовский¹, В.Д. Бучельников¹, М.А. Загребин¹

¹ Челябинский Государственный Университет, Челябинск, Россия

*pavluhinaoo@mail.ru

Одним из наиболее перспективных направлений применения манганитов является возможность использования данных материалов в технологии магнитного охлаждения [1, 2]. Такие материалы являются экономически выгодными и путем изменения фазового состава позволяют в широкой области температур менять температуру фазовых переходов. В данной работе проведены измерения низкополевой намагниченности и магнитокалорического эффекта прямым методом для сплавов $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{Mn}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$ и $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{Mn}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}\text{O}_3$. Поликристаллические образцы $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{Mn}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$ и $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{Mn}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}\text{O}_3$ были получены классическим методом твердофазного синтеза. Температуры, при которых происходят фазовые переходы, были определены на основе температурных зависимостей низкополевой намагниченности, измеренной с помощью оригинального магнитометра, основанного на эффекте Холла. Исследование магнитокалорического эффекта проводилось на установке, разработанной Российской компанией Advanced Magnetic Technologies and Consulting Ltd (AM&TC), которая позволяет измерять адиабатическое изменение температуры при воздействии переменного магнитного поля. В данной работе прямым методом исследованы температурные зависимости магнитокалорического эффекта для $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{Mn}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}\text{O}_3$ и $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{Mn}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$ при изменении магнитного поля $\Delta H = 2$ Тл. Отметим, что для создания магнитных охлаждающих устройств, в частности для области магнитолевитационного транспорта, необходимо, чтобы охлаждающее устройство имело широкий рабочий диапазон. Поэтому в настоящей работе исследована возможность использования нескольких составов манганитов. Для данной цели был изготовлен образец, состоящий из двух частей $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{Mn}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}\text{O}_3$ и $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{Mn}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$. Получено, что температурные зависимости МКЭ для манганита, который содержит две концентрации находится в пределах среднего арифметического для двух сплавов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда № 25-19-20141, <https://rscf.ru/project/25-19-20141/>

[1] A. Ayas, G. Akyol, A. Ekicibil et al., *Mater. Today Commun.*, **35** (2023) 105988.

[2] B.F. Yu, Q. Gao, B. Zhang et al., *Int. J. Refrig.*, **26** (2003) 622.

О ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ДОБРОТНОСТИ СПЛАВА MnTe

А.О. Поплавец^{1,*}, В.Д. Бучельников¹, М.А. Загребин¹, М.В. Матюнина¹, В.В. Соколовский¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*n.poplavets@yandex.ru

На основании комплексного компьютерного моделирования выполнено исследование термоэлектрических свойств антиферромагнитного полупроводника MnTe с гексагональной кристаллической структурой типа NiAs. Методология исследования включала расчёты электронной структуры в приближении теории функционала плотности с последующим моделированием кинетических коэффициентов с использованием программного пакета BoltzTraP2 [1].

Расчет ширины зоны проводимости в теории функционала плотности проводился с использованием функционала GGA PBE и гибридного функционала HSE. Первый функционал дает запрещенную зону величиной 0.59 эВ, второй – 1.33 эВ. Экспериментальное значение составляет 1.3 эВ [3]. В связи с этим ключевым аспектом работы являлся анализ влияния сдвига минимума зоны проводимости на величину 0.74 эВ. Установлено, что данная модификация зонной структуры приводит к увеличению коэффициента Зеебека в области высоких температур. В свою очередь это изменение выражается в улучшении термоэлектрической добротности ZT (рис.1)

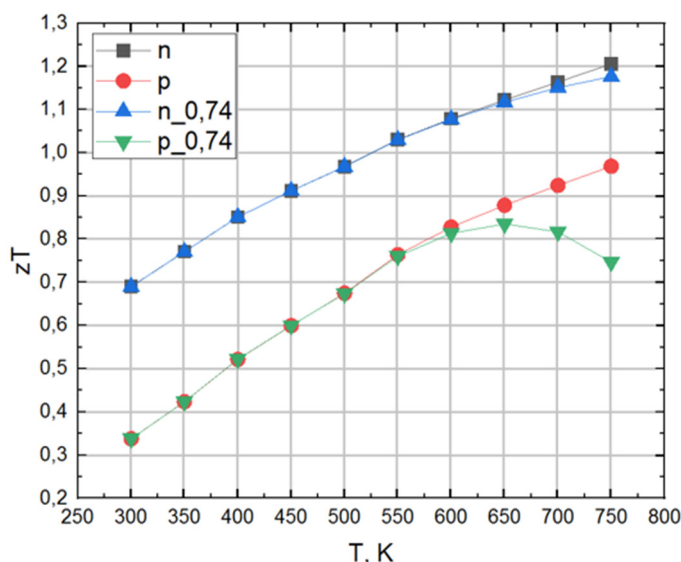


Рис. 1. Зависимость термоэлектрической добротности (ZT) от температуры (T). Красная и черная линии показывают зависимость термоэлектрической добротности от температуры при ширине запрещенной зоны 1.33 эВ для n- и p-типа проводимости соответственно. Синяя и зеленая линии показывают зависимость термоэлектрической добротности от температуры при величине запрещенной зоны 0.59

Результаты работы свидетельствуют о том, что коррекция ширины запрещенной зоны приводит к достижению высоких значений ZT в MnTe только в области высоких температур. Таким образом, показано, что соединение MnTe в целом проявляет высокие значения ZT, которые могут целенаправленно управляться путём комбинированного воздействия на зонную структуру.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания № 075-00186-25-00.

[1] G. Madsen, J. Carrete, M. Verstraete, *Comput. Phys. Commun.*, **231** (2018) 140.

[2] S. Mu, H. Zhao, M. E. Manley, *Phys. Rev. Mat.*, **3** (2019) 1.

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ МОДЕЛИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ ДЛЯ ХОЛОДНОКАТАНОЙ МЕДИ М1Т НА ОСНОВЕ ДИНАМИЧЕСКОГО ИНДЕНТИРОВАНИЯ, ТРЕХМЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Е.С. Родионов^{1,*}, А.Е. Майер¹, В.В. Погорелко¹, А.Я. Черепанов¹, В.Г. Лупанов¹, П.Н. Майер¹

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*rodionoves.pgd@gmail.com

Для разработки инженерных приложений необходимо опираться на теоретические модели поведения материала при динамических и квазистатических нагрузках. Современный прогресс в развитии моделей пластичности, учитывая рост вычислительных мощностей, позволяет рассматривать исследуемый материал в широком диапазоне скоростей деформации и экспериментальных схем (тест Тейлора, плоское соударение пластин, разрывные машины и т.д.). Параметризация теоретических моделей для конкретного металла или сплава позволит лучше соответствовать инженерной практике.

В работе предложено проведение эксперимента о соударении твердого шара с преградой, в котором возможна широкая реализация скоростей деформации до 10^6 с^{-1} , что сопоставимо с экспериментами о плоском соударении пластин. Для метания ударников используется газовая пушка. Ударник представляет собой шарики, диаметрами 4 и 10 мм из карбида вольфрама, мишень – медная пластина марки М1, толщиной 5 мм. Были проведены микроструктурные исследования испытуемых пластин. Средний начальный диаметр зерна, оцененный методом площадей – $25 \pm 1 \text{ мкм}$.

В численной части модель дислокационной пластичности с учетом кинетики дислокаций, дополненная подмоделью изменения размера зерна и роста пор реализована в трехмерном случае с использованием численной схемы гидродинамики сглаженных частиц (SPH) [1]. Ранее эта модель была проверена для задачи о структуре ударной волны при соударении пластин [2]. Модель была параметризована для случая медных цилиндрических ударников [3]. Для существенного ускорения процесса параметризации предлагается использовать современные методы машинного обучения. Работа модели эмулируется с помощью ИНС (искусственной нейронной сети). ИНС обучается с помощью базы данных, в которой собраны результаты расчетов модели дислокационной пластичности. Параметризация модели выполнена с помощью статистического метода Байеса. В настоящей работе предложен дополненный, по сравнению с [3], подход к параметризации модели, позволяющий увеличить количество идентифицируемых параметров модели, а также более подробным сравнением геометрических профилей образцов.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 24-71-00080, <https://rscf.ru/project/24-71-00080>).

[1] E.S. Rodionov, V.G. Lupanov, N.A. Gracheva et al., *Metals*, **12** (2022) 264.

[2] A.E. Mayer, K.V. Khishchenko, P.R. Levashov et al., *J. Appl. Phys.*, **113** (2013) 93508.

[3] E.S. Rodionov, V.V. Pogorelko, V.G. Lupanov et al., *Materials*, **16** (2023) 5602.

ТЕСТЫ ТЕЙЛОРА ДЛЯ СТАНДАРТНОГО И РАДИАЦИОННО-МОДИФИЦИРОВАННОГО ПТФЭ: ЭКСПЕРИМЕНТЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

Е.С. Родионов¹, С.А. Хатилов², А.В. Хохлов^{3,4}, И.Н. Шибанов⁵, А.Е. Майер^{1*}

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² ООО «НПП «АРФЛОН», Москва, Россия

³ Институт механики МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

⁴ Северо-Восточный федеральный университет имени М. К. Аммосова, Якутск, Россия

⁵ Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

*mayer@csu.ru

Политетрафторэтилен (ПТФЭ, фторопласт-4) имеет широкий спектр применений, в том числе благодаря низкому коэффициенту динамического трения. Развиваемая ООО «НПП «АРФЛОН» технология радиационно-индуцированной модификации микроструктуры ПТФЭ [1]кратно повышает его износостойкость [2]. Воздействие γ -излучения при температуре выше плавления кристаллитов приводит к изменению надмолекулярной структуры [1]. С точки зрения, как анализа износостойкости, так и других потенциальных приложений, интерес представляет исследование динамической пластической деформации и разрушения радиационно-модифицированного ПТФЭ в сравнении со стандартным ПТФЭ. В работе проведены тесты Тейлора по высокоскоростному соударению цилиндров диаметром 10 мм и длиной 50 мм с преградой из нержавеющей стали со скоростями до 185 м/с. Показано, что радиационно-модифицированный ПТФЭ характеризуется большей пластичностью и большей прочностью по сравнению со стандартным ПТФЭ. Для численного моделирования проведенных экспериментов релаксационная модель пластичности [3] обобщена на трехмерный случай и внедрена в 3D SPH код [4] на основе метода сглаженных частиц (SPH). Входящее в релаксационную модель время релаксации определено из сравнения с экспериментальными данными.

Тесты Тейлора (эксперименты) выполнены за счет государственного задания Минобрнауки РФ, проект № 075-00186-26-00. Разработка модели и численные исследования выполнены за счет Российского научного фонда, проект № 24-19-00684, <https://rscf.ru/project/24-19-00684/>.

[1] S.A. Khatipov, S.A. Serov, N.V. Sadovskaya et al., *Rad. Phys. Chem.*, **81** (2012) 256.

[2] V.B. Balyakin, S.A. Khatipov, C.K. Pilla, *J. Frict. Wear*, **36** (2015) 448.

[3] T.V. Popova, A.E. Mayer, K.V. Khishchenko, *J. Appl. Phys.*, **123** (2018) 235902.

[4] E.S. Rodionov, V.G. Lupanov, N.A. Gracheva et al., *Metals*, **12** (2022) 264.

ЧИСЛЕННОЕ МГД-МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЖАТИЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОБЛАКОВ МЕЖЗВЕЗДНЫМИ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

И.М. Султанов^{1,*}, С.А. Хайбрахманов^{2,1}

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

*sylvatahof@yandex.ru

В работе с помощью кода FLASH [1] выполняется численное магнитогазодинамическое (МГД) моделирование обжатия цилиндрических молекулярных облаков ударными волнами. Исследуется изотермическое столкновение облака со слабой ударной волной в рамках постановки Дудорова и др [2]. Обжатие облака длиной 2 пк и радиусом порядка 0.1 пк моделируется для перпендикулярного магнитного поля интенсивностью 10^{-5} Гс. Выбранные значения числа Маха соответствуют диапазону скоростей 10-25 км/с, характерных для ударных волн слабой интенсивности. С помощью расчетов исследуется влияние ударных волн на эволюцию и фрагментацию молекулярных облаков. Показано, что в результате столкновения цилиндрического облака с ударной волной, радиальное сжатие облака становится невозможным. Установлено, что обжатие ударной волной приводит к замедлению коллапса на краях волокна. Характерные плотности сгустков на краях составляют порядка 10^{-18} г/см⁻³.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (24-22-20041).

[1] B. Fryxell, K. Olson, P. Ricker et al., ApJS, **131** (2000) 273.

[2] А.Е. Дудоров, А.Г. Жилкин, Н.Ю. Жилкина, *Субпарсековые структуры в межзвездной среде*, Издательство РСЭИ, Москва, 2008.

ГЕНЕРАЦИЯ МАГНИТНЫХ СКЕРМИОНОВ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ Co/Pt

Т.А. Тааев^{1,*}, К.Ш. Хизриев¹

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

*taaev89@mail.ru

Создание и управление скирмионами являются самыми актуальными проблемами в исследованиях магнитных скирмионов в настоящее время [1]. Большую роль в этом играют неоднородности пленок и различные дефекты, которые всегда присутствуют на микро- и наномасштабном уровне. Устойчивость скирмионов в присутствии немагнитных дефектов подробно исследовались в рамках теории переходного состояния [2], где было показано, что зарождения скирмионов энергетически выгодны на немагнитных дефектах.

В настоящей работе мы представили модель магнитного бегового трека для генерации неелевских скирмионов (Рис. 1). Для расчета динамики намагниченности использован пакет микромагнитного моделирования MuMax3 [3]:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = \gamma \frac{1}{1+\alpha^2} \left(\vec{m} \times \vec{H}_{eff} + \alpha \left(\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) \right) \right) + \tau_{ZL}, \quad (1)$$

где τ_{ZL} – слагаемое, описывающее крутящий спиновый момент Жанга-Ли [4]:

$$\tau_{ZL} = \frac{b}{1+\alpha^2} \{ \vec{m} \times (\vec{m} \times (\vec{j} \cdot \nabla) \vec{m}) + (\beta - \alpha) (\vec{m} \times (\vec{j} \cdot \nabla) \vec{m}) \}, \quad (2)$$

где γ – гиромагнитное соотношение, α – коэффициент затухания, m – нормированная намагниченность, H_{eff} – эффективное поле, j – плотность тока, β – неадиабатический фактор, $b = P\mu_B/eM_s(1+\beta^2)$, P – поляризация тока, μ_B – магнетон Бора, e – заряд электрона.

Нами получены условия зарождения магнитных скирмионов при наличии и отсутствии прямоугольного выреза, а также величины спин-поляризованного тока. Определены оптимальные размеры области нуклеации. Наличие выреза и модифицированной области нуклеации положительно влияет на образование скирмионов. Контролируя величину спин-поляризованного тока (управляя амплитудой плотности тока и временем импульса) удалось воспроизвести двоичную систему записи информации, в которой скирмион играл роль бита информации.

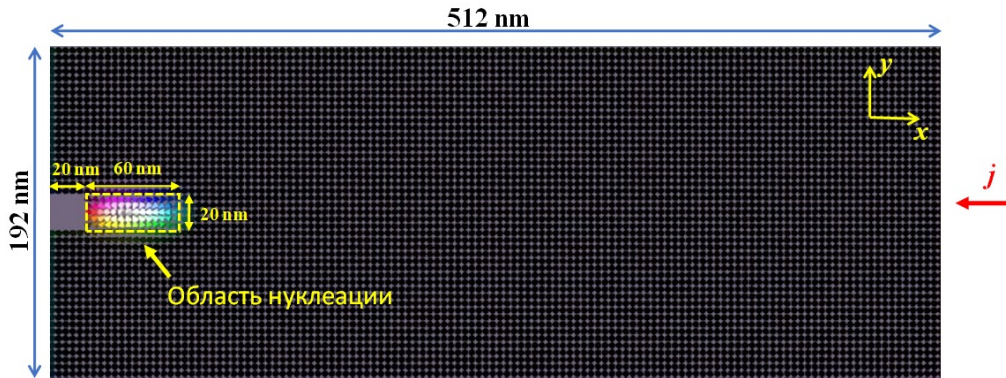


Рис. 1. Модель магнитного бегового трека с вырезом и областью нуклеации. j – плотность спин-поляризованного тока

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 25-22-20086 («Исследование моделей магнитных наносистем с топологически устойчивыми структурами с помощью микромагнитного моделирования»).

- [1] C.Back, et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **53** (2020) 363001.
- [2] P.F.Bessarab, et al., *Computer Physics Comm.*, **196** (2015) 335.
- [3] A.Vansteenkiste, et al., *AIP Advances*, **4** (2014) 107133.
- [4] R.M.Menezes, et al., *Physical Review B*, **99** (2019) 104409.

ПРИМЕНЕНИЕ СВЕРТОЧНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ АНАЛИЗА ИЗОБРАЖЕНИЙ МИКРОСТРУКТУРЫ АЛЮМИНИЯ

А.И. Фатхуллин^{1,*}, А.Е. Майер¹

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*trickster.arthurrr@gmail.com

Актуальной является задача прогнозирования свойств материалов по их микроструктуре. Для решения этой задачи эффективны подходы машинного обучения, в том числе применение сверточных нейронных сетей для анализа изображений и сопоставления им численных (регрессия) или качественных (классификация) характеристик. В настоящей работе описывается опыт применения сверточных нейронных сетей в двух задачах: определение прочностных свойств и классификация типа деформированного состояния кристалла алюминия по его микроструктуре.

Идея с использованием нейросетей, состоящих только из полносвязных слоев, в таких задачах на практике сталкивается с проблемами: быстрым ростом вычислительной сложности с увеличением размеров изображений и сильной тенденцией к переобучению. Проблема решается введением перед полносвязной частью сети последовательности так называемых слоев свертки и субдискретизации [1]. Сети с такой архитектурой могут эффективно контролировать размер сигнала, поступающего на их полносвязные части, а также в ходе обучения приобретают свойство выделять детали изображений, полезных для минимизации функции стоимости, а значит — и для повышения точности ответа.

Сверточная нейронная сеть программно реализована на языке C++ и протестирована на известной модельной задаче о распознавании рукописных цифр из набора MNIST. Наилучший достигнутый результат (точность 99.51% на тестовом наборе) является свидетельством в пользу корректной работы сети.

В качестве обучающих данных использовались результаты молекулярно-динамических расчетов [2], выполненных с помощью кода LAMMPS [3]. На вход сети подавались построенные с помощью программы OVITO [4] изображения молекулярной структуры подвергнутых деформации кристаллов алюминия. В исходном наборе, состоящем из 102 кристаллов, каждый был запечатлен в разрешении 500×500 с шести возможных сторон дважды: со срезом, проходящим через середину кристалла перпендикулярно камере и без него. Далее каждое полученное изображение было дополнительно отражено и трижды повернуто на 90 градусов, что в итоге дало 9792 примера для обучения, разделенных впоследствии на тренировочный и валидационный наборы в отношении 9 к 1 соответственно.

Результаты расчетов показали, что возможно построить и обучить сверточную нейронную сеть, выполняющую задачи: (1) Предсказание предела прочности алюминия с относительной погрешностью порядка 5%; (2) классификации типа деформированного состояния с точностью порядка 95%.

Разработка и тестирование сверточной нейронной сети выполнено за счет государственного задания Миниобнауки РФ, проект № 075-00186-26-00. Применение сверточной нейронной сети к анализу атомной структуры алюминия выполнено за счет Российского научного фонда, проект № 24-19-00684, <https://rscf.ru/project/24-19-00684/>.

[1] I. Goodfellow, Y. Bengio, Aaron Courville, *Deep Learning.*, MIT Press, 2016.

[2] A.E. Mayer, *Scr. Mater.*, **242** (2024) 115905.

[3] A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger, et al., *Comp. Phys. Comm.*, **271** (2022) 10817.

[4] A. Stukowski. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **18** (2010) 015012.

МАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ МНОГОСЛОЙНОЙ НАНОРАЗМЕРНОЙ ПЛЕНКИ ФЕРРИТО-ГРАНАТОВ

В.В. Филиппова^{1,*}, З.В. Гареева¹

¹ Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, Россия

*mukhamadeeva.vika@mail.ru

Исследование топологических структур в материалах с магнитным упорядочением представляет большой интерес. Это связано с широким спектром физических свойств, а также с возможностью их использования в устройствах информационных технологий и спинтронике [1, 2]. Внимание исследователей привлекают низкоразмерные структуры, в которых возможна реализация микромагнитных состояний вихревого типа, представляющих интерес как для фундаментальных исследований, так и для практических приложений. Наноразмеры, наличие нескольких параметров порядка, высокочастотные динамические характеристики магнитных вихрей обеспечивают возможность реализации эффектов масштабирования и создания многоуровневых логических схем на их основе.

Целью данной работы является изучение условий, необходимых для реализации магнитных структур нетривиальной топологии в наноразмерных ферромагнитных пленках с различным типом магнитной анизотропии и наличием взаимодействия Дзялошинского-Мории (вДМ).

Моделирование проводилось с использованием программы OOMMF, основа алгоритма которого является решение уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -|\gamma|\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} (\mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt}) \quad (1)$$

$$\mathbf{H}_{eff} = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{M}} \quad (2)$$

$$F = a^2 \sum_{i=1}^N \int_0^{d_i} dz (A_i \sum_{\mu, \alpha=1}^3 (\partial_{\mu} m_{i\alpha})^2 + \mathbf{D}_{inner} ((\mathbf{m}_{inner} \nabla) \mathbf{m}_{inner} - \mathbf{m}_{inner} (\nabla \mathbf{m}_{inner})) - K_i m_{iz}^2 - \frac{1}{2} M_s \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{H} - J_i \mathbf{m}_i \mathbf{m}_{i+1}) \quad (3)$$

где $\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}$, A_i – константа неоднородного обменного взаимодействия; K_i – константа магнитной анизотропии, J_i – константа межслойного обменного взаимодействия между соседними слоями, $N = 4$ – количество слоев в нанопленке, $\alpha, \mu = x, y, z$, $\mathbf{D}_{inner}$ – вектор Дзялошинского, M_s – намагниченность насыщения.

В данной работе рассматривалась ферромагнитная структура, состоящая из двух би-слоев с различным типом магнитной анизотропии вида «легкая плоскость»-«легкая ось». В качестве материала были выбраны пленки феррито-гранатов с параметрами: $M_s = 50$ кА/м, $A_{1,4} = 2.9 \cdot 10^{-12}$ Дж/м, $A_{2,3} = 4 \cdot 10^{-12}$ Дж/м, $K_{1,4} = -7 \cdot 10^5$ Дж/м³, $K_2 = 2 \cdot 10^5$ Дж/м³, $K_3 = 2 \cdot 10^3$ Дж/м³, $J_{12,34} = 3.5 \cdot 10^{-12}$ Дж/м, $J_{23} = 0.2 \cdot 10^{-12}$ Дж/м, $a = 200$ нм, $h = 24$ нм (для одного слоя) или 96 нм (для всей пленки), $|\mathbf{D}_{inner}| = (1 \div 9) \cdot 10^{-4}$ Дж/м², $J_{12,34}$ – обозначение межслойного обменного взаимодействия между 1 и 2, 3 и 4 слоями.

Исследование показало, что вДМ оказывает существенное влияние на процессы намагничивания и формирование топологических структур в многослойных ферромагнитных системах: в процессе намагничивания и перемангничивания таких систем образуются состояния вида «точек Блоха», конусные скирмионы, кл-скирмионные трубки, бобберы. Вид и структура топологических объектов зависит от величины и знака константы вДМ (D), а также от величины константы магнитной анизотропии вида «легкая плоскость» 4-го слоя..

[1] M.T. Birch, D. Cortés-Ortuño, K. Litzius et al, *Nature Commun.*, **13** (2022) 3630.

[2] Z. Guo et al, *Proceedings of the IEEE*, **8** (2021) 109.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПАКТИРОВАНИЯ НАНОПОРОШКА АЛЮМИНИЯ

А.А. Эбель^{1,*}

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

*ebel_aa@rambler.ru

Ударно-волновое компактирование рассматривается как один из способов для компактирования нанопорошков широко применяется ударно-волновой способ получения изделий [1,2]. Воздействие ударной волны приводит к уплотнению и объединению наночастиц порошка. Актуально выявление влияния различных параметров при проведении компактирования нанопорошков. ударно-волнового воздействия для консолидации наночастиц в монолитный компакт. Молекулярно-динамическое моделирование является одним из методов исследования получения монолитного компакта с помощью ударно-волнового воздействия [3–6].

В данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование динамического сжатия нанопорошка алюминия с диаметрами частиц от 6 нм до 30 нм. Предварительно проводилось моделирование системы наночастиц алюминия с частично нарушенными связями между ними, что оказывает влияние на динамику сжатия. Для снижения повышенной рыхлости нанопорошка проводилось начальное сжатие при давлении 0,2–0,3 ГПа. Далее компактирование проводился уже при давлении 0,5–2 ГПа. При этом объемная доля твердой фазы достигалась 0,92–0,96, после чего происходит распад связанного пустого объема на изолированные полости. Полученные результаты молекулярно-динамического моделирования согласуются с экспериментами [7], в которых практически полностью плотный компакт был получен динамическим уплотнением нанопорошков алюминия при уровне давления 2–3 ГПа. После этого сжатие изолированных полостей сопровождается ускорением роста давления и заканчивается при уровне давления в системе порядка 5–10 ГПа в зависимости от размера частиц. В дальнейшем уже происходит сжатие наноструктурированного твердого компакта.

- [1] W.H. Gourdin, *Prog. Materio Sci.*, **30** (1986) 39.
- [2] G.Sh. Boltachev, N.B. Volkov, V.V. Ivanov et al., *Acta Mech.*, **204** (2009) 37.
- [3] S.P. Kiselev, *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, **48** (2007) 412.
- [4] S.P. Kiselev, *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, **49** (2007) 712.
- [5] L. Huang, W.Z. Han, Q. An et al., *J. Appl. Phys.*, **111** (2012) 013508.
- [6] A.E. Mayer, A.A. Ebel, *J. Appl. Phys.*, **122** (2017) 165901.
- [7] T.G. Nieh, P. Luo, W. Nellis et al., *Acta Mater.*, **44** (1996) 3781.

СОДЕРЖАНИЕ

И.В. Артамонов, М.А. Загребин Исследование <i>ab-initio</i> электронных и магнитных свойств сплава Mn_3Al	3
Г.Я. Атаева, А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев Анализ относительных дисперсий намагниченности, теплоемкости и восприимчивости в четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке для разных типов распределения беспорядка.....	4
А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев, Г.Я. Атаева, М.А. Бабаев Влияние замороженного немагнитного беспорядка на критическое поведение в низкоразмерных моделях Поттса.....	5
Н.В. Бартая, С.А. Хайбрахманов Численная модель динамики магнитных силовых трубок в аккреционных дисках.....	6
П.А. Безбородова, М.А. Загребин Молекулярно-динамическое моделирование кристаллической структуры и упругих свойств сплава Fe_3Ga	7
В.Д. Бучельников, А.А. Ененко, М.В. Матюнина, В.В. Соколовский Термоэлектрические свойства сплава $KScPb$ в кубической фазе.....	8
И.В. Бычков, Д.А. Кузьмин, А.П. Каманцев Влияние давления на свойства титаната бария в области фазового перехода.....	10
Р.Р. Гарипов, М.В. Матюнина Исследование механической стабильности сплавов Гейслера на основе 3-d, 4-d и 5-d металлов.....	11
А.А. Ененко, В.Д. Бучельников Программный пакет для автоматизации вычислений фононной теплопроводности и транспортных свойств.....	12
М.А. Загребин, М.В. Матюнина, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников Магнитострикция ОЦК и ГЦК фаз сплава $Fe-Ga$	13
С.Н. Замоздра Проблема моделирования субрелятивистского столкновения наночастицы с твёрдой мишенью.....	14
Д.Е. Кириллов, М.В. Матюнина Исследование фазовой стабильности сплавов Гейслера на основе переходных металлов.....	15
Д.А. Кузьмин, И.В. Бычков, Е.Г. Екомасов, И.Ф. Шарафуллин Динамика дискретных бризеров в цепочках магнитных наночастиц с учётом диссипации.....	16
Р.М. Латыпов, В.П. Бескачко Дефекты в дихалькогенидах переходных металлов: компьютерное моделирование структуры и свойств.....	17
Т.А. Лукошкина, Д.Ф. Нерадовский Влияние ангармонических поправок к энергии на динамику связанных вихрей в спин-трансферных наноосцилляторах.....	18
М.В. Мамонова, К.С. Кондрашова Первопринципные расчеты кристаллической структуры Fe_2CrSe_4	19
К.Д. Манухина, В.В. Погорелко, А.Е. Майер, О.А. Плехов Исследование эффективности лазерной ударной обработки меди на основе машинного обучения.....	20
М.В. Матюнина, В.В. Соколовский, В.В. Коледов, В.Д. Бучельников Влияние высокого давления на электронную структуру высокотемпературного сверхпроводника $YBa_2Cu_3O_7$	21
Е.В. Морозов, А.В. Головчан Быстрый подход описания магнитных и магнитоструктурных фазовых переходов в сплавах Гейслера на основе $Ni_{51-x}Mn_{33,4}In_{15,6}V_x$ ($x = 0...1$).....	22
В.А. Мутайламов, А.К. Муртазаев Основное состояние декорированной модели Изинга на решетке Кагуме.....	23
Д.В. Новокрещенов, В.В. Соколовский Диаграммы состояния нестехиометрических композиций сплавов $Ni-Co-Mn-Ti$	24

М.А. Обамби, М.А. Загребин, В.Д. Бучельников, Д.Ю. Карпенков Основное состояние и магнитные свойства сплава La-Fe-Si: исследования из первых принципов.....	25
В.В. Павлик, В.А. Грешняков Автоинтеркалированные графитовые слои: первопринципные расчеты.....	26
О.О. Павлухина, М.В. Матюнина, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников, М.А. Загребин Исследование магнитокалорических свойств сплавов La-Sr-Mn-X-O ₃	27
А.О. Поплавец, В.Д. Бучельников, М.А. Загребин, М.В. Матюнина, В.В. Соколовский О термоэлектрической добротности сплава MnTe.....	28
Е.С. Родионов, А.Е. Майер, В.В. Погорелко, А.Я. Черепанов, В.Г. Лупанов, П.Н. Майер Параметризация модели дислокационной пластичности для холоднокатаной меди М1Т на основе динамического индентирования, трехмерного моделирования и машинного обучения.....	29
Е.С. Родионов, С.А. Хатинов, А.В. Хохлов, И.Н. Шибанов, А.Е. Майер Тесты Тейлора для стандартного и радиационно-модифицированного ПТФЭ: эксперименты и моделирование.....	30
И.М. Султанов, С.А. Хайбрахманов Численное МГД-моделирование обжата цилиндрических молекулярных облаков межзвездными ударными волнами.....	31
Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев Генерация магнитных скирмионов в тонких пленках Co/Pt....	32
А.И. Фатхуллин, А.Е. Майер Применение сверточной нейронной сети для анализа изображений микроструктуры алюминия.....	33
В.В. Филиппова, З.В. Гареева Магнитные состояния и процессы перемагничивания многослойной наноразмерной пленки феррито-гранатов.....	34
А.А. Эбель Молекулярно-динамическое моделирование компактирования нанопорошка алюминия.....	35

Научное издание

**АтоМ
FROM ATOMISTIC TO MACRO**

***Сборник тезисов
Второй всероссийской школы-семинара
по компьютерному моделированию
23–25 сентября 2025 года
Челябинск, Россия***

Издается в авторской редакции

Дизайнер обложки Г.Т. Шабанов

Подписано в печать 09.09.25.
Формат 60×84 1/8. Усл. печ. л. 4,6. Уч.-изд. л. 2,5.
Тираж 500 экз. Заказ 609

Челябинский государственный университет
454001, Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129

Отпечатано в издательстве Челябинского государственного университета
454021, Челябинск, ул. Молодогвардейцев, 57б