

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет»

АТОМ

FROM ATOMISTIC TO MACRO

**Сборник тезисов
первой всероссийской школы-семинара
по компьютерному моделированию
27–31 августа 2024 года
г. Челябинск, Россия**

Челябинск
Издательство Челябинского государственного университета
2024

УДК 004
ББК А62
А90

Организационный комитет школы-семинара

В. Д. Бучельников (*председатель*), И. В. Бычков (*зам. председателя*), А. Е. Майер (*зам. председателя*), М. А. Загребин, М. В. Матюнина, О. О. Павлухина, М. В. Утарбекова, П. А. Безбородова (*секретарь*)

Программный комитет школы-семинара

С. В. Таскаев (*председатель*), В. В. Соколовский, Д. А. Кузьмин, В. С. Красников, В. В. Погорелко, С. А. Хайбрахманов, В. А. Грешняков, О. Н. Мирошкина

Локальный комитет школы-семинара

К. Р. Ерагер, Д. Р. Байгутлин, Е. С. Родионов, М. О. Усик

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. первой всерос. школы-семинара по компьютерному моделированию (27–31 августа 2024 г., г. Челябинск, Россия). — Челябинск : Изд-во Челяб. гос. ун-та, 2024. — 84 с. ISBN 978-5-7271-1992-1

Тезисы посвящены последним достижениям, современному состоянию и новым идеям в области компьютерного дизайна, исследованию разнородными 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

ISBN 978-5-7271-1992-1

© Челябинский государственный университет, 2024

Научное издание

Вёрстка *Е. В. Южаковой*

Подписано в печать 13.08.24. Формат 60×84 ¹/₁₆. Усл. печ. л. 4,6. Уч.-изд. л. 2,5.
Тираж 500 экз. Заказ 334

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

Отпечатано в издательстве Челябинского государственного университета
454021, Челябинск, ул. Молодогвардейцев, 576

Алмазоподобные соединения с клатратной структурой

В. А. Грешняков

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
v.greshnyakov@yandex.ru

Углерод в состоянии sp^3 гибридизации способен формировать алмазоподобные соединения различной пространственной протяженности [1–3]. Алмазоподобные соединения широко применяются в качестве абразивных и конструкционных материалов, а также защитных покрытий. Большие перспективы практического использования имеют алмазоподобные соединения с клатратной структурой, состоящей из связанных каркасов фуллеренов, так как они могут быть полупроводниками с высокими механическими характеристиками или ауксетиками [1]. Следовательно, необходимо провести детальное теоретическое исследование новых структурных форм углеродных клатратов.

В работе была изучена возможность формирования клатратной структуры на основе высокосимметричных фуллереноподобных звеньев, состоящих из 20, 24, 26 и 28 атомов. В результате анализа способов совмещения предшественников были обнаружены структуры двух новых алмазоподобных фаз. Первая гексагональная фаза ($sh-C_{68}$) формируется на основе звеньев C_{20} , C_{24} и C_{28} . Структура этой фазы близка к структуре углеродного клатрата 2-го типа ($fcc-C_{34}$). Вторая фаза ($sh-C_{108}$) также имеет гексагональную симметрию, однако ее структура формируется из звеньев C_{20} , C_{26} и C_{28} (рис. 1).

Расчеты кристаллической структуры и свойств выполнялись методом теории функционала плотности при использовании обобщенного градиентного приближения. Плотности новых фаз $sh-C_{68}$ и $sh-C_{108}$ находятся в диапазоне значений от 2.989 до 2.993 г/см³, которые примерно на 13 % меньше соответствующего значения для 3С алмаза. Разностные полные энергии клатратов $sh-C_{68}$ и $sh-C_{108}$ относительно энергии алмаза соответственно равны 0.08 и 0.10 эВ/атом, поэтому новые углеродные клатраты должны

быть устойчивы при нормальных условиях. Также установлено, что новые фазы sh-C68 и sh-C108 должны быть диэлектриками, так как величина запрещенной зоны в этих фазах меньше соответствующей величины для кубического алмаза приблизительно на 15 %.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Челябинской области (грант ГЗ № 075-00187-24-00).

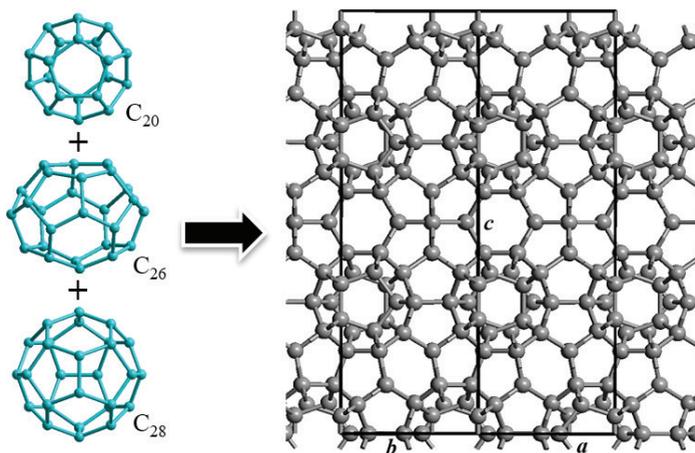


Рис. 1. Способ получения структуры нового гексагонального клатрата

- [1] E. A. Belenkov, V. A. Greshnyakov, *Phys. Solid State*, **58** (2016) 2145–2154.
- [2] V. A. Greshnyakov, E. A. Belenkov, *J. Exp. Theor. Phys.*, **133** (2021) 744–753.
- [3] V. A. Greshnyakov, *J. Struct. Chem.*, **64** (2023) 324–334.



Термоэлектрические свойства сплавов Гейслера на основе щелочных металлов

М. В. Матюнина, Д. Р. Байгутлин, В. В. Соколовский,
В. Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

**matunins.fam@mail.ru*

Особенности электронной структуры и наличие запрещенной зоны на уровне Ферми в полусплавах Гейслера (НН) позволяют рассматривать данные материалы в качестве перспективных для применения в области спинтроники и термоэлектроники [1–3]. Возможность сочетать различные химические элементы привела к экспериментальному обнаружению высокоэффективных термоэлектрических материалов, таких как NbFeSb [4], TaFeSb [5], ZrCoBi [6]. Замена переходного металла в классическом НН щелочным [7–9] позволила получить новый класс соединений (d^0 - d), зонная структура которых демонстрирует как полупроводниковый, так и полуметаллический тип поведения. В рамках теории функционала плотности проведены расчеты термоэлектрических свойств d^0 - d сплавов на основе системы KScZ (Si, Ge, Sn, Pb, Sb, Bi). Найдено, что данные сплавы являются полупроводниками с шириной запрещенной зоны от 0,5 до 1,72 эВ. На рисунке 1 представлена мера добротности, рассчитанная по формуле $ZT = S^2\sigma T / (k_c + k_l)$, где S — коэффициент Зеебека, σ — электропроводность материала, T — абсолютная температура, k_c , k_l — электронная и решеточная теплопроводности соответственно. Наибольшие значения ZT найдены в сплаве KScPb для двух типов носителей.

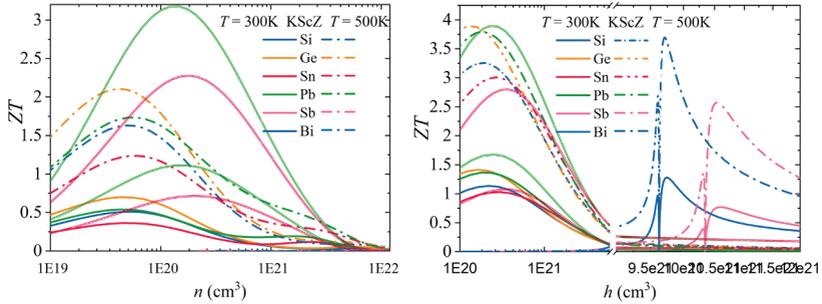


Рис. 1. Мера добротности ZT полуславо Гейслера $KScZ$ при температурах 300 К и 500 К для разных типов носителей: а) электронов, б) дырок

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-12-20032.

- [1] C. Felser, G. H. Fecher, B. Balke. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **46** (5) (2007) 668–699.
- [2] K. Elphick, W. Frost, M. Samiepour, T. Kubota, K. Takanashi, H. Sukegawa, S. Mitani, A. Hirohata. *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **22** (2021) 235–271.
- [3] G. Rogl, and P. F. Rogl. *Crystals.*, **13** (2023) 1152.
- [4] C. Fu, S. Bai, Y. Liu, Y. Tang, L. Chen, X. Zhao, T. Zhu. *Nat. Commun.*, **6** (2015). 8144.
- [5] H. Zhu, J. Mao, Y. Li, J. Sun, Y. Wang, Q. Zhu, G. Li, Q. Song, J. Zhou, Y. Fu, *Nat. Commun.*, **10** (2019) 270.
- [6] H. Zhu, R. He., J. Mao, Q. Zhu, C. Li, J. Sun, W. Ren, Y. Wang, Z. Liu, Z. Tang, et al. *Nat. Commun.*, **9** (2018) 2497.
- [7] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Yu. Chtchelkanova, D. M. Treger, *Science.*, **294** (2001) 1488.
- [8] W. E. Pickett, J. S. Moodera, *Phys. Today*, **54** (2001) 39.
- [9] A. Dehghan, S. Davatolhagh, *Mater. Chem. Phys.*, **273** (2021) 125064.

между энергией основного состояния кристалла целиком и суммы энергий основного состояния атомов по отдельности.

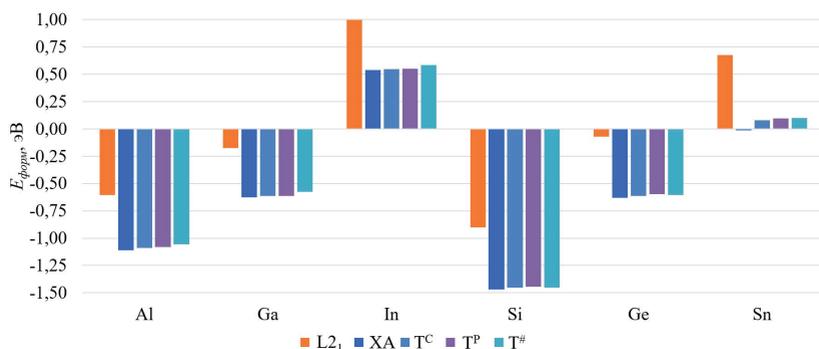


Рис. 1. Распределение энергий формирования.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 075-00187-24-00).

- [1] Y-I Matsushita et al, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **50** (2017) 095002.
- [2] Y. He et al., *Adv. Funct. Mater.*, **32** (2022) 2107513.
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996) 3865.



Исследование структуры и свойств сплавов $\text{FeRhSn}_{1-x}\text{Z}_x$ ($\text{Z} = \text{Pb}, \text{Ge}$)

О. О. Павлухина, В. В. Соколовский, В. Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
pavluhinaoo@mail.ru

Одним из наиболее перспективных направлений применения сплавов Гейслера является спинтроника, так как данные сплавы демонстрируют полуметаллическое поведение [1]. В представленной работе с помощью теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP, исследованы магнитные свойства и электронная структура сплавов $\text{FeRhSn}_{1-x}\text{Z}_x$ ($\text{Z} = \text{Pb}, \text{Ge}$). Исследования проведены в рамках приближения обобщенного градиента (GGA) в формулировке Пердью, Бурка и Эрнзерхофа (Perdew, Burke and Ernzerhof — PBE). Параметры для всех исследованных структур вычислены на 12-атомной суперячейке. Сплавы полу-Гейслера имеют кубическую структуру (CI_b), которая принадлежит к пространственной группе F-43m, и могут находиться в трех возможных конфигурациях [2] — фазы α , β и γ . Показано, что для всех исследуемых сплавов энергетически выгодна γ -фаза. Рассчитаны значения равновесных параметров решетки и магнитных моментов для сплавов $\text{FeRhSn}_{1-x}\text{Z}_x$. Показано, что полученные значения хорошо согласуются с имеющимися в литературе данными для исследованных трехкомпонентных систем FeRhSn и FeRhGe . В работе также получены новые четырехкомпонентные половинные сплавы Гейслера, обладающие полуметаллическими свойствами. Для исследованных композиций $\text{FeRhSn}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) и $\text{FeRhSn}_{1-x}\text{Pb}_x$ ($x = 0, 0.25, 0.5$) спиновая поляризация составила 100 %. Картина плотности электронных состояний для $\text{FeRhSn}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ представлена на рисунке 1. Получено, что добавление Ge в трехкомпонентный сплав FeRhSn приводит к смещению уровня Ферми в сторону больших энергий, а также наблюдается небольшое изменение положения валентной зоны и зоны проводимости относительно уровня Ферми.

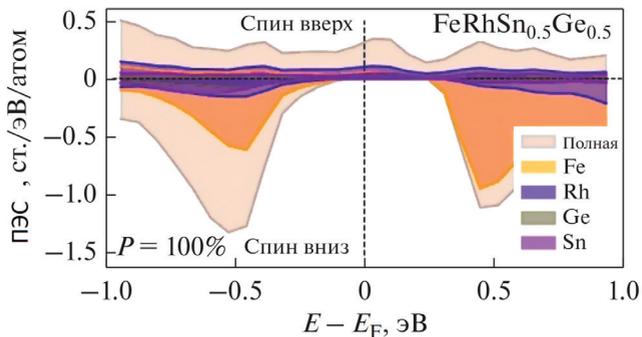


Рис. 1. Полная и частичная плотность электронных состояний для сплава $\text{FeRhSn}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 22-12-20032).

[1] J. Ma, V. I. Hegde., et al., *Phys. Rev. B.*, **95** (2017) 024411.

[2] R. Meenakshi, R. A. S. Srinivasan, et al., *Phase Transit.*, **94** (2021) 415–435.

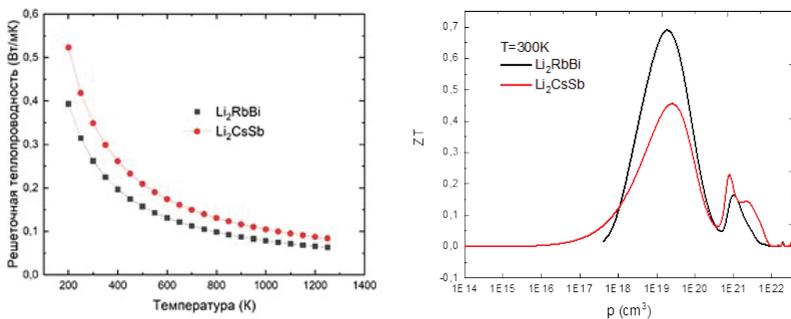


Рис. 1. (а) Температурная зависимость решеточной теплопроводности сплавов Li_2CsSb и Li_2RbBi ; (б) зависимость термоэлектрической добротности от концентрации при легировании сплава Li_2RbBi и Li_2CsSb дырками

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда проект № 22-12-20032.

- [1] G. Kresse, F. Jürgen, *Phys. Rev. B.*, **54** (1996) 11169.
- [2] R. Meenakshi, R. Aram Senthil Srinivasan et al., *Phase Transit.*, **94** (2021) 415–435.
- [3] Tian Qin, Qi Zhang et al., *Comput. Phys. Commun.*, **237** (2019) 199–207.



Влияние обменно-редуцированного дефекта на взаимодействие скирмионов в магнитных пленках

Д. И. Абдрахманов, И. Ф. Шарафуллин

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
dron.boiko@mail.ru

Скирмионы в низкоразмерных неколлинеарных магнетиках представляют собой топологически устойчивые спиновые конфигурации, которые могут быть стабилизированы с помощью, например, обменного взаимодействия Дзялошинского — Мория (ВДМ), внешнего поля в магнитных пленках [1–3]. Однако скирмионы могут существовать и в тонкопленочных структурах, не содержащих ВДМ, поскольку стабилизирующие эффекты могут возникать за счет других взаимодействий и фрустрации [4]. Активно ведутся исследования о влиянии обменно-редуцированного дефекта обменной связи на эти фазы скирмионов под воздействием внешних полей, таких как приложенное напряжение, внешнее магнитное поле для применений в устройствах спинтроники [5–7].

Мы рассматриваем решеточную фазу скирмиона, стабилизированную ферромагнитным обменом, взаимодействием Дзялошинского — Мория и внешним магнитным полем, действующим перпендикулярно плоскости. Полная энергия тонкой пленки на треугольной решетке определяется выражением

$$H_m = - \sum_{i,j} J_{i,j}^m \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{i,j} \vec{D}_{i,j} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] - \sum_i \vec{H}^o \cdot \vec{S}_i .$$

Здесь мы предполагаем, что $J_{i,j}^m > 0$ характеризует ферромагнитное взаимодействие между одним спином и его ближайшими соседями в плоскости. Второй член выражения характеризует энергию ВДМ, где $\vec{D}_{i,j} = -\vec{D}_{j,i}$, $|\vec{D}_{i,j}| = D$ — это вектор Дзялошинского — Мория. Последний член выражения определяет зеемановскую энергию, \vec{H}^o — напряженность внешнего магнитного поля, направленная перпендикулярно плоскости слоя.

Определив энергию системы, мы вносим в решетку дефект. Рассматриваемый нами дефект изменяет обменную энергию следующим образом:

$$J_{i,j}^m = \frac{J_0}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{K_{ij} - \frac{D_{def}}{2}}{\vartheta} \right) \right), \quad K_{ij} = \left| \frac{\vec{r}_i + \vec{r}_j}{2} - \vec{r}_q \right|,$$

здесь J_0 — константа ферромагнитного обмена на бесконечности; коэффициент ϑ определяет ширину области изменения обменного интеграла; D_{def} определяет диаметр вводимого дефекта, измеряемого в узлах решетки; \vec{r}_q радиус вектор, определяющий центр вводимого дефекта; \vec{r}_i определяет положение рассматриваемого узла; вектор \vec{r}_j определяют положение соседних узлов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 24–29–00702).

[1] A. Derras-Chouk, E. M. Chudnovsky, *J. Phys Condens Mat.*, **33** (2021) 195802.

[2] E. B. Magadeev, R. M. Vakhitov, R. R. Kanbekov, *J. Phys.: Condens. Mat.*, **35** (2023) 015802.

[3] I. F. Sharafullin, M. K. Kharrasov, H. T. Diep, *Phys. Rev. B.*, **99** (2019) 214420.

[4] S. E. Hog, I. F. Sharafullin, H. T. Diep, H. Garbouj, M. Debbichi, M. Said, *J. Magn. and Magn. Mat.*, **563** (2022) 169920.

[5] S. Zhang, J. Zhang, Y. Wen, E. M. Chudnovsky, X. Zhang, *Appl. Phys. Lett.*, **113** (2018) 192403.

[6] B. Huang, M. A. McGuire, A. F. May, D. Xiao, P. Jarillo-Herrero, X. Xu, *Nat. Mat.*, **19** (2020)1276.

[7] C. Reichhardt, C. J. O. Reichhardt, M. V. Milošević, *Rev. Mod. Phys.*, **94** (2022) 035005.



Исследование пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке методом Монте-Карло в чистом и разбавленном режимах

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

¹Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала, Россия

²Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

³Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия

ataeva20102014@mail.ru

Модель Поттса служит основой теоретического описания широкого ряда разнообразных объектов и явлений в физике конденсированных сред [1; 2]. Эта модель позволяет проверить влияние немагнитного беспорядка на фазовые переходы (ФП) и изучить их особенности. В настоящей работе проверена справедливость теоретического предположения о роде и локализации температуры T_f ФП в пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в чистом и разбавленном режимах.

Гамильтониан слабо разбавленной пятикомпонентной ферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке выглядит следующим образом [1]:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = P_1, P_2, P_3, P_4, P_5,$$

где J — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших спинов, P_i — обозначение состояния i -го спина. Гистограммный анализ данных [3] использованный нами наряду с методом кумулянтов Биндера четвертого порядка, позволил определить не только род ФП, но и минимальные значения L для моделируемых систем в вычислительном эксперименте. Наличие бимодальности в распределении энергии свойственно для ФП первого рода (см. рис. 1). Гистограммный анализ данных был проведен для

пятикомпонентной модели Поттса в слабо разбавленном режиме при концентрации спинов $p=0.90$ и $T=T_c$. При этом бимодальность в распределении энергии обнаружить не удалось (см. рис. 2).

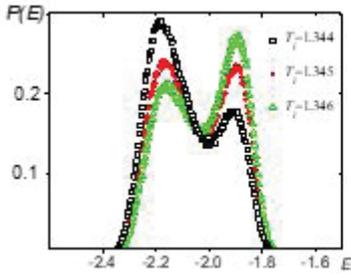


Рис. 1. Гистограмма распределения энергии для модели Поттса вблизи T_c при $p=1.0$

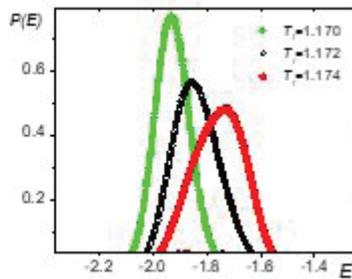


Рис. 2. Гистограмма распределения энергии для модели Поттса вблизи T_c при $p=0.9$

Таким образом, результаты моделирования пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке демонстрируют, что в ней наблюдается фазовый переход первого рода в чистом режиме. Внешение незначительного немагнитного беспорядка в рассматриваемую модель Поттса приводит к фазовому переходу второго рода.

[1] А. Н. Ермилов, *Физика элементарных частиц и атомного ядра*, **20** (1989) 1479–1544.
 [2] А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *Вычислительная физика и проблемы фазовых переходов*, М.: Физматлит (2023) 184 с.
 [3] К. Eichhorn, К. Binder, *J. Phys. Cond. Matter.*, **8** (1996) 5209.

воздействием со стороны антиферромагнетика. Ориентация намагниченности свободной пленки легко меняется в области нуля поля. На рис. 1b представлена общая петля гистерезиса системы, которую можно сопоставить с экспериментальными работами.

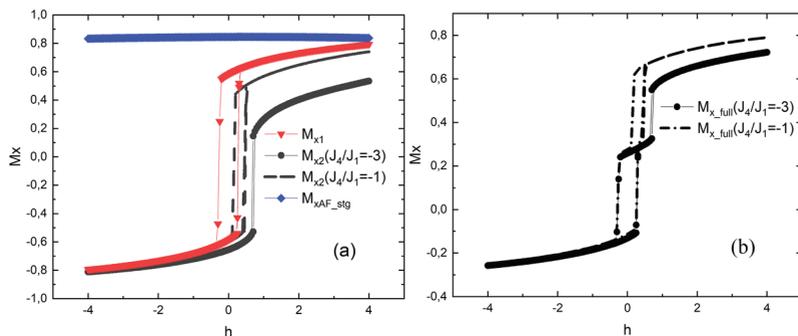


Рис. 1. Петли гистерезиса намагниченности для отдельных пленок (а) и всей структуры (б) с анизотропией типа “легкая плоскость” при температуре $T=1.0J_1/k_b$

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект 23–22–00093).

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

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

Влияние конкурирующих взаимодействий на фазовые переходы в антиферромагнитной модели Поттса на ОЦК-решетке

Д. Р. Курбанова, А. К. Муртазаев,
М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра
РАН, Махачкала, Россия

d_kurbanova1990@mail.ru

Порядок фазового перехода в модели Поттса зависит от пространственной размерности и числа состояний q . Фазовые переходы в антиферромагнитных моделях Поттса более сложны, чем в ферромагнитных моделях, поскольку сильно зависят от микроструктуры решетки. Отдельный интерес представляет то, что в антиферромагнитной модели Поттса плотность энтропии основного состояния остается ненулевой без фрустрации. Одним из физических примеров является спиновое стекло. Стекла Поттса обычно используют для описания большого класса анизотропных ориентационных стекол [1].

В настоящей работе на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга — Ландау метода Монте-Карло мы исследуем влияние конкуренции обменного взаимодействия на фазовые переходы и термодинамические свойства трехмерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на объемно-центрированной кубической решетке. Гамильтониан модели:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \delta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \delta_{i,k},$$

где J_1 и J_2 — параметры обменных взаимодействий для первых и вторых ближайших соседей. Расчеты проводились для систем с ПГУ и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 8 \div 64$. Получены температурные зависимости основных термодинамических параметров. Обнаружено, что конкуренция обменных взаимодействий в диапазоне $-0.6 \leq J_2 < 0$ приводит к фазовому расслоению. Используя метод разности плотности энергии состояний и гистограммный анализ

данных проведен анализ порядка фазовых переходов. На рисунке 1 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей J_2 . На диаграмме наблюдаются несколько различных фаз: частично разупорядоченная фаза (PD1), упорядоченная фаза (LS) и частично разупорядоченная фаза (PD2). Анализ порядка ФП, проведённый для всего рассмотренного интервала J_2 , показывает, что фазовый переход из PD1 фазы в парамагнитную фазу является переходом второго рода, а переход из PD2 фазы в парамагнитную фазу — первого рода.

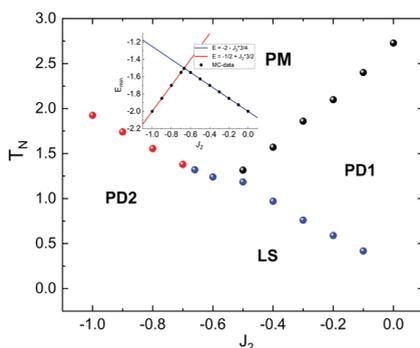


Рис. 1. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от J_2 .

Работа выполнена при поддержке фонда Гаджи Махачева по поддержке науки, образования и культуры.

[1] F. Y. Wu, The Potts model. *Rev. Mod. Phys.*, **54** (1982) 235.

Антиферромагнитная модель Поттса во внешнем магнитном поле

М. К. Мазагаева, А. К. Муртазаев,
М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра
РАН, Махачкала, Россия
mazagaeva86@mail.ru

Изучение влияния внешнего магнитного поля на фазовые переходы (ФП) и термодинамические свойства магнитных спиновых систем является одной из значимых задач физики конденсированного состояния. Это обусловлено тем, что различные классы искусственных магнитных материалов демонстрируют широкий спектр необычных физических свойств при учете внешнего магнитного поля [1–3].

Для изучения ФП, магнитных и термодинамических свойств в магнитных спиновых системах успешно используются спиновые решеточные модели. Одной из таких моделей является модель Поттса [4]. Интерес к этой модели обусловлен тем, что модель Поттса служит основой теоретического описания широкого круга физических свойств и магнитных явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся некоторые классы адсорбированных газов на графите, сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, различные многослойные магнитные системы, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. В качестве примера веществ можно привести пленки, адсорбированные атомами водорода (2×2)– $2\text{H}/\text{Ni}(111)$ на поверхности никеля $\text{Ni}(111)$ [5].

К настоящему моменту времени ферромагнитная модель Поттса достаточно хорошо изучена благодаря ее универсальности. В отличие от ферромагнитной модели, физические свойства антиферромагнитной модели Поттса сильно зависят от микроскопической структуры решетки. Отсутствие универсальности является основной причиной того, что понимание антиферромагнитной модели Поттса менее развито. В связи с этим в данной работе изучается

влияние внешнего магнитного поля на характер ФП, магнитные и термодинамические свойства двумерной четырехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на гексагональной решетке методом Монте-Карло (МК).

В данной работе приведены результаты исследования влияния магнитного поля на ФП, магнитные и термодинамические свойства двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке. Исследование выполнено с использованием репличного обменного алгоритма метода МК. Получены магнитные структуры основного состояния в широком интервале значений магнитного поля. Показано, что в зависимости от величины внешнего магнитного поля в данной модели наблюдаются шесть различных типов упорядочения.

На основе гистограммного метода МК проведен анализ характера фазовых переходов. Обнаружено, что интервалах магнитного поля $0.0 \leq h \leq 3.0$ и $6.0 \leq h \leq 6.5$ реализуется фазовый переход первого рода. При значениях внешнего магнитного поля $h = 3.5$ и 5.5 система становится фрустрированной, а в интервалах магнитного поля $4.0 \leq h \leq 5.0$ система находится вблизи режима фрустраций. Показано, что при $h \geq 9.0$ магнитное поле подавляет фазовый переход в системе.

- [1] С. С. Сосин, Л. А. Прозорова, А. И. Смирнов, *УФН.*, **175** (2005) 92–99.
- [2] M. Kazuaki, O. Yukiyasu, *Phys. Rev. B.*, **101** (2020) 184427-1-184427-11.
- [3] Р. С. Гехт, *УФН.*, **159** (1989) 261–296.
- [4] F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.*, **54** (1982) 235–268.
- [5] K. Budde, L. Schwenger, C. Voges, H. Pfner, *Phys. Rev. B.*, **52** (1995) 9275–9282.



Фазовые переходы в модели Изинга с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей во внешнем магнитном поле

К. Ш. Муртазаев, М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев,
М. К. Рамазанов, М. Р. Джамалудинов

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала, Россия
5kurban@mail.ru

Магнитные системы с конкурирующими обменными взаимодействиями находят большой интерес в области физики конденсированного состояния. Наличие в системе конкурирующих взаимодействий кардинально меняет магнитные и термодинамические свойства системы [1].

В данной работе изучаются особенности фазовых переходов (ФП) в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с конкурирующими взаимодействиями и магнитным полем (МП).

Гамильтониан модели Изинга с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей и магнитного поля имеет вид:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - J_2 \sum_{\langle\langle i,l \rangle\rangle} S_i \cdot S_l - h \sum_i S_i,$$

где $S_{i,j,l} = \pm 1$ — изинговский спин, $J_1 = -1$ и $J_2 = -0.5$ — константы обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей, h — величина магнитного поля (приводится в единицах $|J_1|$). В данной работе $k = J_2 / J_1 = 0.5$ — соотношение обменных взаимодействий. В рассматриваемой системе сосуществуют 4 подрешетки.

Наиболее эффективными и точными для изучения систем с конкурирующими обменными взаимодействиями является репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло. В данной работе используется репличный алгоритм [2].

Численный расчёт проводился с использованием периодических граничных условий. Линейные размеры рассматриваемых систем

составляют $L=8\div 24$. Количество спинов в системе $N=L\times L\times L\times 2$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 2\cdot 10^4$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка тестируемой модели. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль Марковской цепи длиной до $\tau = 20\tau_0$ МК шагов на спин.

Методом Монте-Карло, выполнено исследование антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия магнитного поля для случая $k=J_2 / J_1=0.5$. Анализ результатов показывает, что с ростом температуры в интервале значений магнитного поля $0.0 \leq h \leq 5.0$ происходит ФП второго рода, а в интервале $5.0 \leq h \leq 7.0$ в системе происходят два ФП 2 рода. В интервале значений МП $8.0 \leq h \leq 11.0$ происходит фазовый переход первого рода. МП $h \geq 11$ подавляет ФП. В данной модели найдены значения магнитных полей, при которых происходит частичное разупорядочение основного состояния. Показано, что переход из антиферромагнитного состояния в ферромагнитное состояние происходит как ФП 2 рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 20-32-90079 — аспиранты. Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС». Исследование выполнено в рамках научной программы НЦФМ (проект «Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях»).

- [1] Ш. Ма, Современная теория критических явлений. Мир, М. 1980.
- [2] K. Z. Binder, Phys., **43** (1981) 119.



Фазовая диаграмма и основное состояние ферромагнитной декорированной модели Изинга на треугольной решетке с антиферромагнитным взаимодействием в торых ближайших соседей

В. А. Мутайламов, А. К. Муртазаев

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала, Россия
vadim.mut@mail.ru

С использованием методов вычислительной физики исследовано статическое критическое поведение двумерной декорированной модели Изинга на треугольной решетке. Декорированные спины располагаются между узлами исходной решетки. Гамильтониан исследованной модели имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2}J_1 \sum_{ij} S_i S_j - \frac{1}{2}J_2 \sum_{kl} S_k S_l - \frac{1}{2}J_d \sum_{mn} S_m S_n, \quad S_i = \pm 1,$$

где S_i — изинговский спин в узле решетки i , первая сумма учитывает обменное взаимодействие между ближайшими узловыми спинами, вторая сумма обменное взаимодействие между следующими за ближайшими узловыми спинами, третья сумма обменное взаимодействие между узловыми и декорированными спинами. В данной работе мы ограничились частным случаем, когда взаимодействие между первыми соседями является ферромагнитным с величиной $J_1 = 1$, а взаимодействие между вторыми соседями антиферромагнитным с величиной $J_2 = -1$. Значения J_1 и J_2 не изменялись в ходе моделирования. Обменное взаимодействие между узловыми спинами и декорированными изменялось в широких пределах от антиферромагнитного с величиной $J_2 = -3$ до ферромагнитного с величиной $J_2 = 3$.

Для различных значений J_d определено основное состояние модели, вычислены критические температуры, построена фазовая диаграмма. Показано, что добавление декорированных спинов

изменяет свойства исходной модели. Характер изменения зависит от соотношения декорированного и узлового обменных взаимодействий. Полученная фазовая диаграмма приведена на рисунке 1, где FI — обозначает ферримагнитную фазу, F — ферромагнитную, P — парамагнитную, $ST1$ — страйповую однополосную. $ST1_{AF}$ и $ST1_F$ обозначают области фазы $ST1$, в которых декорированные спины выстраиваются преимущественно антипараллельно и параллельно узловым соответственно. Переход из частично разупорядоченной фазы $ST1$ в парамагнитную является фазовым переходом первого рода, как и в исходной недекорированной модели. Переход из упорядоченных фаз FI и F в парамагнитную фазу является фазовым переходом второго рода.

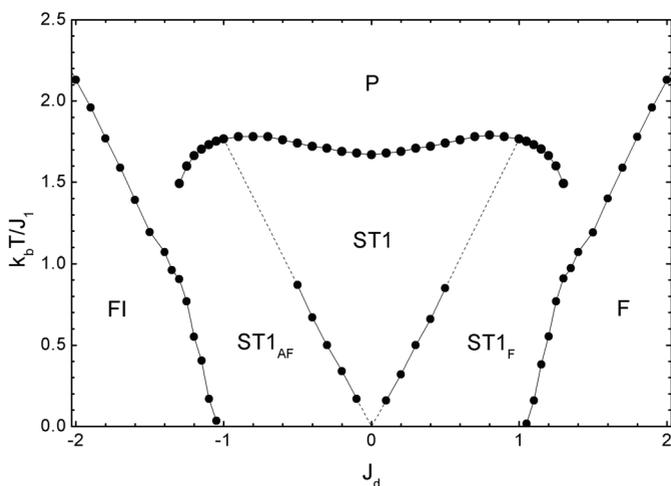


Рис. 1. Фазовая диаграмма исследуемой модели

Нуклеация и переключение скирмионов под действием упругих деформаций и магнитного поля

А. Г. Нугуманов, И. Ф. Шарафуллин

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
aidar.nugumanov@gmail.com

Магнитные скирмионы — топологически устойчивые спиновые структуры, которые могут существовать в магнитных материалах при некоторой комбинации конкурирующих взаимодействий, таких как обмен, анизотропия, взаимодействие Дзялошинского-Мория (ДМ), магнитоэлектрическое взаимодействие и т. д. [1] При этом, в классических решеточных моделях магнитных материалов принято рассматривать «замороженные» кристаллические решетки для упрощения вычислений с помощью учета симметрии. Однако, взаимодействия обменного типа, как правило зависят от расстояния между спинами, и изменение геометрии кристалла [2]. В данной работе мы рассматриваем модель, в которой узлы ферромагнитной пленки с треугольной симметрией связаны с ближайшими соседями с помощью простейшей силы упругости, описанной Робертом Гуком [формула (2)], а обменное и ДМ-взаимодействие зависят от расстояния между соответствующими узлами. Гамильтониан модели:

$$\mathcal{H}_i = -H \cdot S_i^z - \sum_{j=1}^6 \{J_0 \exp(1 - |\vec{d}_{ij}|) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D_0 \vec{d}_{ij} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j]\}. \quad (1)$$

Здесь \vec{S}_i — Гейзенберговский спин на i -м узле, индекс j указывает на шесть его ближайших соседних узлов, H — внешнее магнитное поле, направленное перпендикулярно плоскости пленки, J_0 и D_0 — модули обменного и ДМ-взаимодействий, а $\vec{d}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ — радиус-вектор, направленный от узла i к узлу j и по модулю равный расстоянию между ними. Обратим внимание на то, что обменное взаимодействие убывает с увеличением расстояния, ДМ-взаимодействие ему пропорционально.

Как было сказано выше, силу упругости между соседними узлами мы опишем с помощью закона Гука в следующей форме:

$$\vec{F}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \sum_{j=1}^6 \vec{F}_j(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^6 \kappa(|\vec{d}_{ij}| - 1) \frac{\vec{d}_{ij}}{|\vec{d}_{ij}|}. \quad (2)$$

Здесь \vec{F}_j — сила, действующая на i -й узел со стороны узла j , κ — коэффициент упругости. Эта сила линейно зависит от расстояния, притягивает узлы при $|\vec{d}_{ij}| > 1$, отталкивает при $|\vec{d}_{ij}| < 1$ и обращается в нуль при равновесном расстоянии $|\vec{d}_{ij}| = 1$.

В рамках данной работы будет проведено моделирование влияния упругих деформаций кристаллической решетки, описанной формулой (1) на зарождение, уничтожение и переключение скирмионов в присутствии внешнего магнитного поля.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект 24-29-00702).

[1] A. G. Nugumanov, I. F. Sharafullin, M.Kh Kharrasov, *Lett. Mater.*, **13** (2023) 317.

[2] Г. С. Дедов, А. О. Шориков, *Письма в ЖЭТФ.*, **119** (2024) 684.



Квазиоднородные магнитные структуры в ограниченных двухслойных пленках

Р. Р. Нугуманов, Е. Б. Магадеев, И. Ф. Шарафуллин

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
ratmir.nugumanov.99@mail.ru

В последние годы значительное число работ в области магнитных явлений посвящено изучению топологически защищенных объектов (скирмионов, бимеронов и т.д. [1]). Объекты такого типа формируются, как правило, лишь в материалах, параметры которых удовлетворяют вполне определенным соотношениям, причем зачастую эти требования оказываются весьма трудновыполнимыми в случае однородных магнитных пленок [2]. Одним из возможных выходов из этой ситуации является создание многослойных образцов, обладающих эмерджентными свойствами [3].

Можно показать, что двухслойная ферромагнитная пленка, каждый из слоев которой в отдельности характеризуется одноосной анизотропией либо типа «легкая ось», либо типа «легкая плоскость», может не соответствовать ни одному из этих двух типов. Вместо этого направление легкого намагничивания в этой двухслойной пленке при определенных условиях составляет с направлением оси анизотропии фиксированный угол α_0 . Наличие такого отклонения обусловлено тем, что при близких к нулю значениях константы анизотропии K , усредненных по толщине пленки, в магнетике возникает эффективная магнитная анизотропия нового типа.

Влияние размагничивающих полей в рамках решаемой задачи может быть учтено путем замены константы K на ее эффективное значение. Если пленка является бесконечной, то к K добавляется величина $K_s = -2\pi M_s^2$ в соответствии с известным выражением для анизотропии формы. Однако при конечных размерах образца данная поправка оказывается равной fK_s , где величина множителя f определяется геометрией пленки. Значения f в случае образца в форме диска диаметра D и толщины h были рассчитаны аналитически (синяя кривая на рис. 1). В случае образца

квадратной формы значения f подбирались в процессе моделирования с использованием пакета OOMMF [5] (красные точки на рис. 1; при этом под D понималась сторона квадрата). Тем самым было показано, что влияние размагничивающих полей в ограниченных образцах не препятствует формированию квазиоднородных структур, характеризующихся нетривиальным углом α_0 наклона вектора намагниченности, однако подбор материалов, в которых может наблюдаться изучаемый эффект, требует учета правильного значения $f \neq 1$.

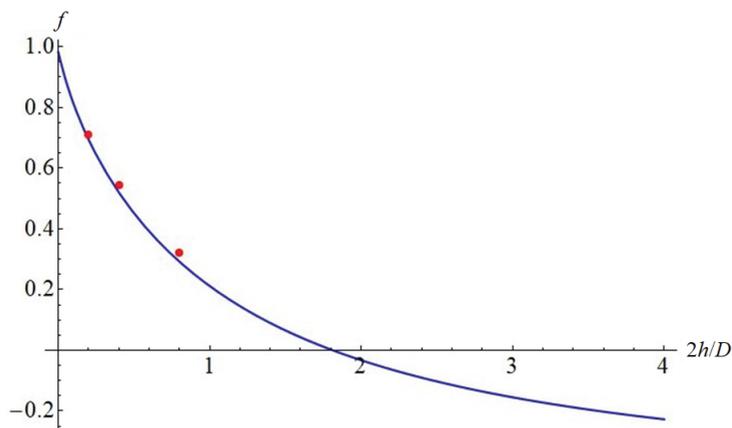


Рис. 1. Зависимость множителя f от толщины h пленки и ее диаметра D

[1] K. Everschor-Sitte, J. Masell, R. M. Reeve, M. Kläui, *J. Appl. Phys.*, **124** (2018) 240901.

[2] R. Mansell, J. Huhtasalo, M. Ameziane, S. van Dijken, S., *J. Appl. Phys.*, **134** (2023) 243901.

[3] B. Huang, M. A. McGuire, A. F. May, D. Xiao, P. Jarillo-Herrero, X. Xu, *Nat. Mat.*, **19** (2020) 1276.



Фазовые переходы в модели Изинга с фрустрациями

М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала, Россия
sheikh77@mail.ru

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических явлений модели Изинга с фрустрациями является одной из актуальных задач физики конденсированного состояния. Модель Изинга вызывает интерес у исследователей, начиная с 1925 года, когда было найдено точное решение для случая одномерной цепочки [1]. В настоящее время известно большое количество магнитных материалов, ряд свойств которых с успехом можно описать моделью Изинга. К ним относятся, например, фториды (MnF_2 , FeF_2 и др.). Модель Изинга, помимо традиционных приложений в магнетизме, нашла множество приложений, тесно связанных с кооперативными явлениями в разных областях исследований.

При описании критических явлений в решеточных системах на основе различных вариантов модели Изинга получена обширная информация о поведении различных термодинамических величин в широком диапазоне температур и других физических параметров. В последние годы методами вычислительной физики интенсивно исследуется и критическая область с вычислением значений критических индексов. Центр тяжести теоретических исследований переместился к изучению более реалистичных моделей Изинга с учетом многочисленных факторов, присущих реальным кристаллам и не учитываемых в рамках моделей первого приближения. К таким факторам относятся: анизотропия, примеси, диполь-дипольные взаимодействия, колебания решетки, фрустрации и др.

Важное место занимают исследования сложных магнитных структур, таких, как сильно фрустрированные магнитные соединения и металлические наносистемы, спиновые стёкла, спиновый лед и др. Физические свойства фрустрированных спиновых систем сильно отличаются от соответствующих систем без фрустраций.

Природа ФП, магнитные структуры основного состояния, критические и термодинамические свойства спиновых систем с фрустрациями зависят от многих внешних факторов. Наличие фрустраций в системе может привести к новому физическому поведению. При исследовании влияния фрустраций на ФП, термодинамические, магнитные и критические свойства спиновых систем получено большое количество интересных результатов [2; 3]. Несмотря на достигнутые успехи, на сегодняшний день все еще остаются открытыми некоторые вопросы, касающиеся ФП, критических, термодинамических и магнитных свойств спиновых систем с фрустрациями.

В данной работе нами обсуждаются результаты, полученные на основе метода Монте-Карло для моделей Изинга на решетках различных размерностей и типов. Основное внимание уделено результатам, полученным при изучении фазовых переходов, критических и термодинамических свойств моделей Изинга с учетом обменных взаимодействий первых и вторых соседей, а также внешнего магнитного поля. Получены фазовые диаграммы зависимости критической температуры от величины обменного взаимодействия вторых соседей и внешнего магнитного поля. Определены области наблюдения фазовых переходов первого и второго рода. Установлены классы универсальности критического поведения.

[1] E. Ising, *Z. Phys.*, **31** (1925) 253–258.

[2] F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, M. K. Badiev, *ЖМММ*, **324** (2012) 3418–3421.

[3] С. Е. Коршунов, *УФН*, **176** (2006) 233–274.



Исследование двумерной антиферромагнитной модели Поттса на решетке кагоме

Т. Р. Ризванова, М. К. Рамазанов,
А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра
РАН, Махачкала, Россия
rizv@yandex.ru

В настоящее время большой научный интерес представляют исследования фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств магнетиков, описываемых двумерными решеточными моделями Поттса [1–2]. Эти модели описывают большой класс реальных физических систем. В зависимости от числа состояний спина q и пространственной размерности модель Поттса демонстрирует ФП первого или второго рода, что также подтверждается результатами исследований двумерной ферромагнитной модели Поттса методом Монте-Карло (МК). Это связано с тем, что степень вырождения основного состояния системы, магнитные и термодинамические свойства, природа ФП в модели Поттса зависят от типа решетки и от соотношения обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей.

В связи с этим, в данной работе на основе метода МК проведены исследования ФП и термодинамических свойств двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на решетке кагоме с взаимодействием первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей. Поскольку поведение модели Поттса очень сильно зависит от величины J_2 , особый интерес представляет изучение природы ФП при различных соотношениях величины антиферромагнитного обменного взаимодействия вторых ближайших соседей. Методом МК вычислены плотности состояний $g(E)$, рассчитаны температурные зависимости энтропии S , построена гистограмма распределения энергии для систем с различными линейными размерами L .

На рис. 1 предоставлены гистограммы распределения энергии для систем с различными линейными размерами L при $J_1 = -1$ и $J_2 = 0.5$. Наличие одного пика на гистограммах является характерным признаком ФП второго рода.

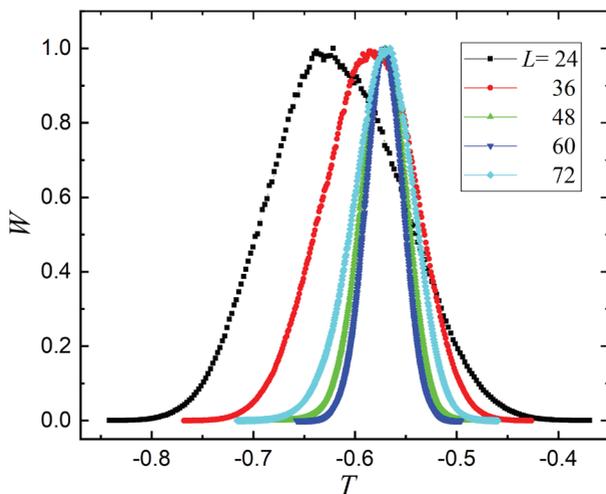


Рис. 1. Гистограммы распределения энергии для различных L при $J_1 = -1$ и $J_2 = 0.5$

[1] H. T. Diep. Frustrated Spin Systems, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).

[2] R. J. Baxter. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics (Academic, New York, 1982; Mir, Moscow, 1985).



Микромагнитное моделирование магнитных систем

Т. А. Тааев, К. Ш. Хизриев, А. К. Муртазаев

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра
РАН, Махачкала, Россия
taaev89@mail.ru

Создание магнитных тонких пленок и гетероструктур, исследование и управление их свойствами, а также применение данных структур в электронных приборах — целая область, которой занимается спинтроника [1]. В настоящее время для изучения магнитных микро- и наноструктур прибегают к использованию пакетов микромагнитного моделирования, таких как OOMMF, MuMax3 и т.д. [2; 3]. Это связано в первую очередь с тем, что создание структур с необходимыми характеристиками и свойствами требует большого количества времени и ресурсов, а также огромного опыта экспериментаторов.

Нами для исследования магнитотвердых/магнитомягких гетероструктур и систем с магнитными скирмионами был использован пакет микромагнитного моделирования MuMax3 [3]. В пакете MuMax3 для расчета динамики намагниченности используется уравнение Ландау — Лифшица — Гилберта [3]:

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

где γ — гиромагнитное отношение, α — коэффициент затухания, m — вектор намагниченности и H_{eff} — эффективное поле.

Эффективное поле определяется как:

$$\vec{H}_{eff} = \vec{H}_{exch} + \vec{H}_{anis} + \vec{H}_{demag} + \vec{H}_{ext} + \vec{H}_{DMI} + \vec{H}_{therm}, \quad (2)$$

где H_{exch} , H_{anis} , H_{demag} , H_{ext} , H_{DMI} , H_{therm} — вклад обменного взаимодействия, анизотропии, размагничивающего поля, Зеемановская энергия, энергия Дзялошинского — Мориа, а также вклад температуры в энергию системы.

В работе проведен краткий обзор результатов применения данного пакета в исследовании магнитотвердых/магнитомягких гетероструктур в зависимости от толщины слоев и направления внешнего магнитного поля, а также результаты моделирования динамики скирмионов на магнитных дорожках и управления их движением с помощью различных дефектов.

Исследования выполнены в рамках научной программы НЦФМ (проект «Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях»).

- [1] D. Sander et. al., *Journal of Physics D: Appl. Phys.*, **50** (2017) 363001.
- [2] M. J. Donahue, D. G. Porter, OOMMF user's guide, version 1.0. NISTIR 6376, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (1999).
- [3] A. Vansteenkiste et. al., *AIP Advances*, **4** (2014) 107133.



Исследование теплопроводности графинов методом молекулярной динамики

В. В. Колесников^{1,2}, Р. Т. Мурзаев², Ю. А. Баимова²

¹Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов, Уфа, Россия
slavakolesnikov140@yandex.ru

Двумерные материалы стали объектом активных исследований из-за их уникальных механических и физических свойств [1–2]. Один из таких материалов — графин, представляющий собой монослой атомов углерода с sp - и sp^2 -гибридизацией и особым расположением атомов в решетке. Графин представляет большой интерес для использования в различных областях, например для новых электронных устройств. В данном исследовании была проведена оценка теплопроводности графина с использованием метода молекулярной динамики.

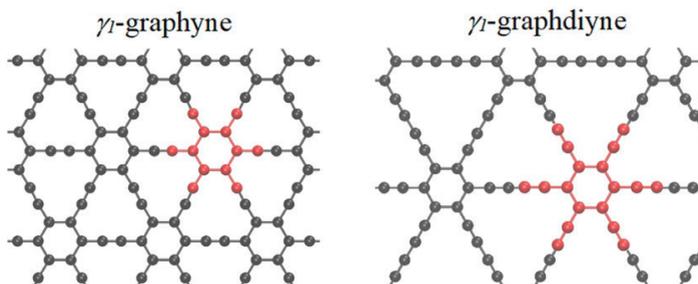
Расчитаны коэффициенты теплопроводности для пяти конфигураций графина (α , β_1 , β_2 , γ_1 и γ_2) и сопоставлены со значениями для графена. Для расчёта коэффициентов теплопроводности выбраны размеры структур: $L_x \approx 400$ Å, $L_y = 100$ Å, $L_z = 100$ Å. Размер ячейки моделирования по нормали к слою графина выбран так, чтобы он во много раз превышал толщину графина. Все расчеты проводятся с использованием программного пакета LAMMPS и межатомного потенциала AIREBO. Расчеты выполнены с использованием NVE-ансамбля.

Расчёт коэффициентов теплопроводности проводилось методом Ланжевена, который заключается в описании динамики систем, подверженных случайным колебаниям [3]. Уравнение Ланжевена моделирует эволюцию переменных системы, путем включения как детерминированных, так и стохастических параметров.

Результаты расчётов показали, что коэффициент теплопроводности альфа-графина в 5 раз меньше коэффициента теплопроводности графена.

Понижение коэффициента теплопроводности связано с тем что плотность атомов углерода в графине меньше чем в графене.

Исследование теплопроводности является важным для дальнейшего применения графинов в электронных устройствах.



Пример структуры графинов

Выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ 20–72–10112-П.

- [1] M. Xue, H. Qiu, and W. Guo, *Nanotechnology*, **24** (2013) 505.
- [2] A. Hirsch, *Nature Mater*, **9** (2010) 868–871.
- [3] B. Liu, C. D. Reddy, J. Jiang, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, A. A. Nazarov, K. Zhou, *Appl. Phys. Lett.*, **101** (2012) 21.



Исследование влияния фуллерена C_{60} на теплопроводность меди методом молекулярной динамики

Р. А. Миронов^{1,2}, Р. Т. Мурзаев², Ю. А. Баимова²

¹Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов, Уфа, Россия
mayrxd@mail.ru

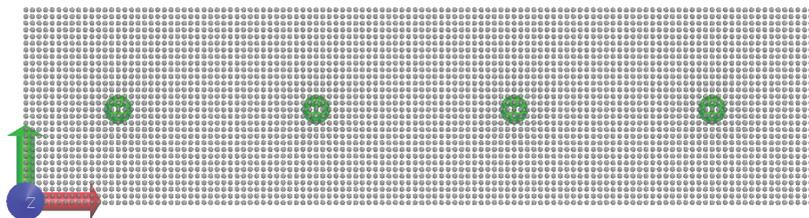
Исследование физических и химических свойств фуллерена, как элемента композитов, является актуальным, так как углерод-металлические композиты все больше входят в нашу жизнь [1]. В настоящее время обсуждаются идеи использования фуллеренов в создании фотоприемников и оптоэлектронных устройств, катализаторов роста, алмазных и алмазоподобных пленок, сверхпроводящих материалов. Фуллерены применяются в синтезе композитов с улучшенными свойствами [2].

Расчитаны коэффициенты теплопроводности для трех структур: меди, меди с фуллереном C_{60} , меди без фуллерена C_{60} . Данные сопоставлены со стандартными значениями для меди из литературы [3]. Для расчёта коэффициентов теплопроводности выбраны размеры структур: $L_x \approx 217 \text{ \AA}$, $L_y = 54 \text{ \AA}$, $L_z = 36 \text{ \AA}$. Все расчеты проводятся с использованием программного пакета LAMMPS и межатомных потенциалов EAM для взаимодействия Cu — Cu, AIREBO для взаимодействия C — C, Леннарда — Джонса для взаимодействия C — Cu. Расчеты выполнены с использованием NVE-ансамбля.

Расчёт коэффициентов теплопроводности проводилось методом Ланжевена, который заключается в описании динамики систем, подверженных случайным колебаниям. Уравнение Ланжевена моделирует эволюцию переменных системы путем включения как детерминированных, так и стохастических параметров.

Результаты проведённых расчётов показали, что внедрение частиц фуллерена C_{60} в медь приводит к понижению коэффициента теплопроводности на всем температурном интервале от 100 до 1000 К. В температурном интервале от 100 до 800 К наблюдается понижение коэффициента теплопроводности в среднем на 20 %.

Такое поведение связано с тем, что фуллерен образует поры в структуре меди, что в свою очередь препятствует передаче тепла.



Начальная структура меди с фуллеренами в проекции на плоскость xz .

Выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ 20–72–10112–П.

- [1] З. З. Латыпов, Л. Н. Гааль, *Науч. Приборостроение*, **15** (2005) 82–87.
- [2] С. В. Разоренов, М. Ю. Попов, *Журнал технической физики*, **84** (2014) 74.
- [3] N. P. Kobelev, R. K. Nikolaev, N. S. Sidorov, Ya. M. Soifer, *Physics of the Solid State*, **43** (2001) 2344.



Исследование влияния хиральности на механические свойства диаманта: атомистическое моделирование

П. В. Полякова¹, Р. Т. Мурзаев¹, Ю. А. Баимова^{1,2}

¹ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

² Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

polina.polyakowa@yandex.ru

Весь класс двумерных структур представляется многообещающим с точки зрения создания новых устройств, сверхпроводников и суперконденсаторов, поскольку для них обнаружено большое количество новых физических эффектов [1]. Одним из таких материалов является диамант, который состоит из двух кристаллических слоев графена, в котором половина атомов углерода покрыта атомами водорода/фтора/хлора, а другая половина связывает два слоя друг с другом ковалентной связью [2]. В данной работе методом молекулярной динамики исследуется влияние хиральности на прочностные свойства диаманта.

Рассмотрены две морфологии диаманта (D-AA и D-AB) и семь углов хиральности: от 0° до 30° с шагом 5°, где 0° направление «кресло», а 30° — «зигзаг» (рис. 1). Размеры начальных структур: $L_x=L_y=350$ Å. Для исследования механических свойств хиральных диамантов проводится одноосное растяжение постоянной скоростью деформации 0.01 пс^{-1} . Все расчеты проводятся с использованием бесплатного программного пакета LAMMPS и межатомного потенциала AIREBO [3].

Установлено, что прочность диаманта сильно зависит от хиральности. Максимальный предел прочности наблюдается для хиральности 10°, что составляет 562 ГПа для D-AA и 543 ГПа — для D-AB. Деформация разрушения уменьшается с увеличением угла хиральности от 0° до 20°, после чего до 20° остается постоянной. Основными механизмами деформации диаманта являются удлинение ковалентных связей и вращение валентных углов. Полученные в работе результаты позволяют проанализировать влияние морфологии диамантов на их механические свойства для будущих применений.

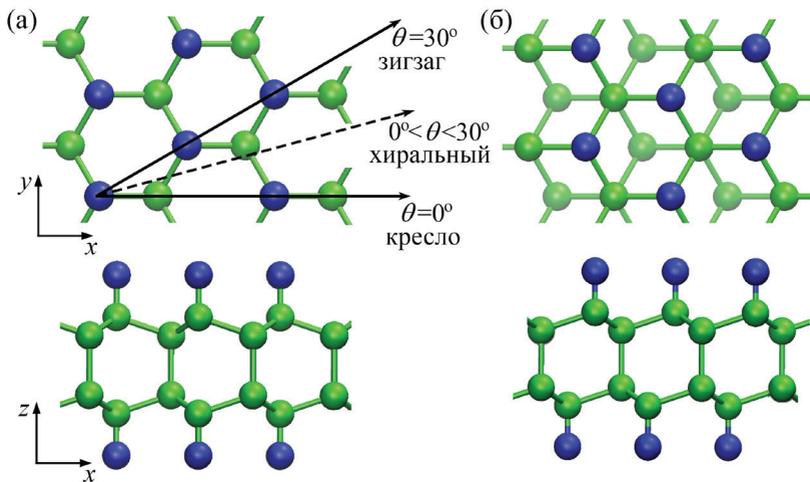


Рис. 1. Начальные структуры двух морфологий алмаза:
 (а) — D-AA, (б) — D-AB в двух проекциях ось x у, ось xz .
 Зеленым показаны атомы углерода, синим — водорода

- [1] K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A. H. Castro Neto, *Science*, **353** (2016) aac9439.
- [2] L. A. Chernozatonskii, P. B. Sorokin, A. G. Kvashnin, D. G. Kvashnin, *JETP Letters*, **90** (2009) 134–138.
- [3] S. J. Stuart, A. B. Tutein, J. A. Harrison, *J. Chem. Phys.*, **112** (2000) 6472–6486.

Влияние взаимодействия Ni и Cu с графеном на механические свойства композита графен/металл: атомистическое моделирование

А. Р. Сафина, К. А. Крылова, Ю. А. Баимова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия
saflia@mail.ru

На сегодняшний день особый интерес ученых привлекает скомканый графен, который не уступает по физико-механическим свойствам графену, при этом является более простым в получении и более экономичным с точки зрения практической реализации. Недавно было показано, что путем добавления наночастиц Ni в скомканый графен посредством деформационно-термической обработки был получен прочный композитный материал [1]. Физико-механические свойства таких материалов сильно зависят от выбора металла. В данной работе методом атомистического моделирования исследуются механические свойства композитов графен/металл с сильным (Ni) и слабым (Cu) взаимодействием с графеном.

На рисунке 1 показаны начальные структуры исследуемых композитов графен/Ni и графен/Cu, где графеновая сетка и наночастицы металлов показаны отдельно. Механические свойства структур оцениваются в процессе одноосного растяжения.

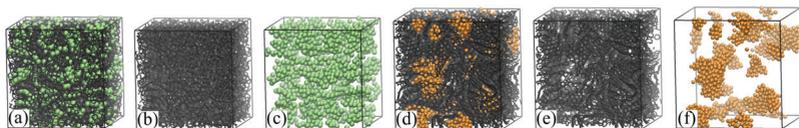


Рис. 1. Начальная структура композита (a-c) графен/Ni и (d-f) графен/Cu (b, e) Графеновая сетка и (c, f) наночастицы металлов представлены отдельно.

В табл. 1 представлены основные механические характеристики композитов графен/металл, такие как предел прочности, деформация разрушения и модуль Юнга, полученные после одноосного

растяжения. Результаты показывают, что самой высокой прочностью и модулем Юнга обладает композит графен/Ni. Это можно объяснить наличием сильной связи между Ni и графеном, за счет которого уже на первых этапах обработки наночастицы Ni оборачиваются чешуйками графена и формируются жесткие структурные элементы, которые далее трансформируются в прочную графеновую сетку с равномерно распределенными атомами Ni (см. рис. 1b). В случае рассмотрения композита графен/Cu (см. рис. 1d) можно увидеть, что большинство наночастиц Cu коагулировали, так как наночастицы сильнее взаимодействуют между собой, чем с графеном, что препятствует формированию прочной непрерывной графеновой сетки.

Таблица 1

Предел прочности (σ , GPa), деформация разрушения (ϵ_f) и модуль Юнга (E , GPa) композитов графен/Ni и графен/Cu.

Структура	σ , GPa	ϵ_f	E , GPa
графен/Ni	89.5	0.45	296.9
графен/Cu	35.1	0.75	65.9

Результаты моделирования показывают, что механические свойства композитов графен/металл сильно зависят от выбранного металла и их силы взаимодействия с графеном.

[1] L. R. Safina, K. A. Krylova, J. A. Baimova, *Mater. Today Phys.*, **28** (2022) 100851.



Композит графенового аэрогеля и никеля: молекулярная динамика

И. И. Тувалев, И. И. Мурзаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия
illumnus102@gmail.com

В работе, вышедшей в 2016 году, сообщали об исключительно стабильном сотовом аллотропе углерода [1]. Эти гексагональные ячеистые структуры представляют собой графеновые соты и обладают перспективой к использованию в качестве компонента для новых композитных материалов, о чем прямо писали исследователи. Однако на данный момент исследование подобных композитов экспериментальными методами затруднено.

В рамках данной работы методом молекулярной динамики были исследованы композитные материалы с графеновым аэрогелем в качестве матрицы и никелем в качестве наполнителя. Композиты отличались длиной стенки гексагональной ячейки. Так же были рассмотрен кристалл чистого никеля и графеновый аэрогель без наполнителя.

В процессе релаксационной обработки в композит демонстрирует высокую степень устойчивости. Была исследована механическая прочность структур и проведён сравнительный анализ. Основные результаты, демонстрирующие механические характеристики исследуемых структур, представлены на рис. 1.

Ячеистые структуры (композит и графеновый аэрогель без наполнителя) демонстрируют превосходство механических характеристик над никелем. Выявлена корреляция между размером плеча ячеистых структур и напряжением разрыва: чем меньше длина плеча, тем больше прочность. Помимо этого, выявлено, что смена направления деформации так же влияет на деформационное поведение ячеистых структур. Главным отличием композита и графенового аэрогеля является отсутствие этапа, в течении которого напряжение не растет в результате того, что деформация идет на ликвидацию гексагональных пор.

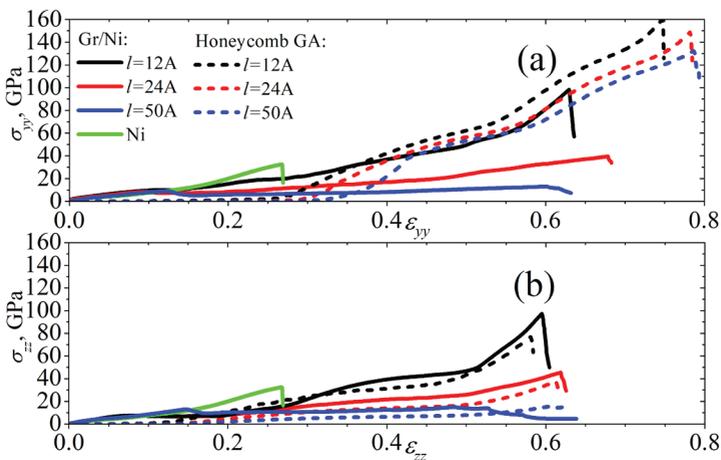


Рис. 1. Графики зависимости напряжения от деформации при растяжении (а) вдоль оси Y, (б) вдоль оси Z

Работа авторов поддержана грантом РФФ № 20-72-10112-П.

[1] N. V. Krainyukova, E. N. Zubarev, *Phys. Rev. Lett.*, **116** (2016) 055501.

Молекулярное моделирование полиоксометаллатов в водном растворе и на межфазной границе металл/раствор

△ А. Тузов, Р. Р. Назмутдинов

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия
mr.hulkbuster@gmail.com

Редокс-активные полиоксометаллаты являются одними из молекулярных катализаторов электрохимического выделения кислорода [1]. В качестве примера мы исследуем сэндвичевый комплекс Викли с четырьмя центрами Co(II) (рис. 1а). Интерес к такому объекту подогревается тем, что до сих пор не ясно, что служит каталитически активной формой — сам полиоксометаллат или продукты его деградации [2, 3]. Поскольку анион несёт большой положительный заряд, в данной работе методом молекулярной динамики (пакет LAMMPS) детально изучена его ассоциация с катионами Na в объёме водного раствора.

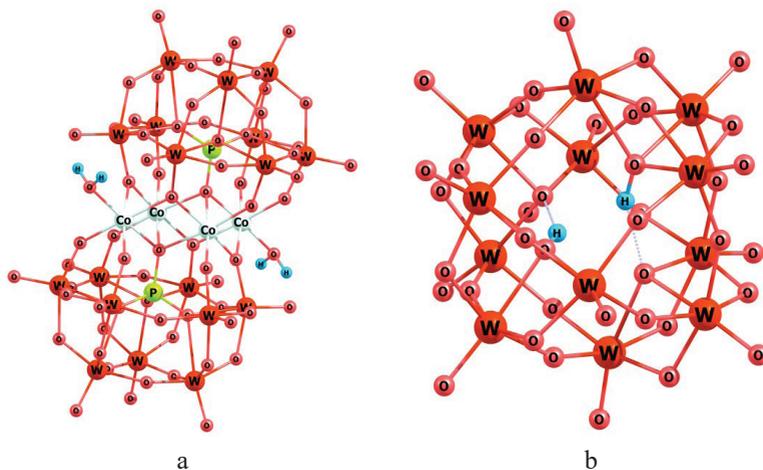


Рис. 1. Оптимизированные структуры полиоксометаллата $[Co_4(H_2O)_2(PW_9O_{34})_2]^{10-}$ (а) и мета-поливольфрамата $m-[W_{12}O_{40}H_2]^{6-}$ (б)

Поливольфраматные анионы обладают интересной особенностью образовывать адсорбционные монослои на поверхности электродов в контакте с раствором электролита [4–6], обладающие барьерными свойствами в электрохимических реакциях и демонстрирующие в ряде случаев селективную проницаемость. В нашей работе методом молекулярной динамики смоделированы различные упаковки адсорбционных решёток мета-поливольфрамата (рис. 1b) на межфазной границе ртуть/вода в присутствии Na^+ ; получены детальные структурные и динамические характеристики монослоя.

Геометрические и зарядовые характеристики исследуемых систем получены с помощью расчетов методом функционала плотности.

Работа поддержана РНФ (проект No. 23-23-00398).

[1] Y.Zhang, Y.Li, H.Guo, Y.Guo, R.Song, *Mater. Chem. Front.*, **8** (2024) 732–768.

[2] J. J. Stracke, R. G. Fink. *J. Amer. Chem. Soc.*, **133** (2011) 14872–14875.

[3] J. W. Wickers, H.Lv, J. M. Sumliner, G.Zhu, Zh.Luo, D. G. Musaev, Yu. V. Geletti, C. L. Hill. *J. Amer. Chem. Soc.*, **135** (2013) 14110–14118.

[4] M. I. Borzenko, G. A. Tsirlina, O. A. Petrii. *Mend. Comm.*, **12** (2002) 126–127.

[5] M. I. Borzenko, G. A. Tsirlina, O. A. Petrii. *Rus. J. Electrochem.*, **36** (2000) 452–455.

[6] O. V. Cherstiouk, G. A. Tsirlina. *Mend. Comm.*, **28** (2018) 254–256.



Применение метода роя частиц для построения уравнений состояния веществ

К. А. Боярских^{1,2}, К. В. Хищенко^{1,2,3}

¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

³Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия
boyarskikh.ka@phystech.edu

В настоящей работе рассматривается численный метод решения задач оптимизации с помощью роя частиц [1] и его применение к построению уравнений состояния веществ. При работе алгоритма выделяется область пространства параметров решаемой задачи, в которой задается набор векторов (рой частиц). Эти частицы перемещаются по области, перебирая наборы параметров (координат частиц), для которых рассчитывается значение заданного функционала. Параметрами задачи являются константы уравнений состояния в рамках выбранных моделей, а функционалом служит отклонение результатов расчетов по уравнению состояния от экспериментальных данных. По мере движения в пространстве параметров задачи элементы роя обмениваются друг с другом информацией о наилучших положениях, в которых каждой частице довелось побывать. Подобранные параметры численного метода позволяют всем частицам сойтись в окрестность точки оптимума (с заданным радиусом) за конечное число итераций.

Представлены результаты работы метода роя частиц для жидких металлов алюминия и никеля. Рассчитаны термодинамические параметры границ области фазового равновесия жидкость — пар, изобар, ударных адиабат и изоэнтроп разгрузки. Достигнуто хорошее количественное согласие между результатами расчетов и измерений.

Полученные уравнения состояния могут быть использованы при гидродинамическом моделировании процессов при высоких давлениях и температурах.

[1] J. Kennedy, R. Eberhart, *Proc. of IEEE Int. Conf. on Neural Networks (Perth, WA, Australia, 1995)*, 4 (1995) 1942–1948.

Пространственно локализованные нелинейные колебания в цепочке магнитных эллипсоидов

И. В. Бычков¹, Д. А. Кузьмин¹,
Е. Г. Екомасов², В. Г. Шавров³

¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

³Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН,
Москва, Россия

bychkov@csu.ru

Свойствам периодических массивов магнитных наночастиц уделяется внимание достаточно долгое время. Помимо их потенциальной прикладной пользы, эти массивы предоставляют удобную платформу для изучения различных нелинейных магнитных волновых явлений. Ангармоническая локализация колебаний в решетках занимает особое место среди других нелинейных волновых явлений. Дискретные бризеры (ДБ) представляют собой периодические во времени и пространственно локализованные возбуждения. В отличие от своих континуальных аналогов, которые обычно существуют только в интегрируемых системах, ДБ могут существовать в дискретных средах, которые не обязательно описываются интегрируемыми уравнениями. Ранее существование ДБ было предсказано теоретически для цепочек магнитных наноточек связанных диполь-дипольным взаимодействием. Однако в расчетах предполагалось отсутствие диссипации, а также не учтено наличие размагничивающих полей в наночастицах с конечными размерами. Настоящая работа посвящена исследованию возможности и условий существования ДБ в цепочке магнитных наночастиц, с учетом указанных особенностей.

Каждая частица представляет собой эллипсоид с полуосями a , b и c . Предполагается, что размеры частиц и температурный режим, позволяют считать частицы однодоменными с однородным распределением намагниченности. Моделирование динамики намагниченности в такой цепочке наночастиц проведено в рамках

численного решения уравнения Ландау — Лифшица с учетом диссипативного члена в форме Гильберта.

Проведено моделирование ДБ в цепочки из 50 наночастиц Ni с размерами $a = b = 100$ нм, $c = 10$ нм и расстоянием между частицами $l = 500$ нм при отсутствии диссипации. При моделировании начальное отклонение 25-й частицы составляло $M_z = 0.85M_0$, намагниченности всех остальных частиц были направлены вдоль оси x . В указанной цепочке магнитных наночастиц обнаружено существование ДБ, особенно ярко выраженных в цепочках частиц с $a = b \gg c$ (т.е. близких по форме к дискам). Без диссипации компоненты намагниченности M_x и M_y совершают осцилляции, в то время как компонента M_z остается практически неизменной. Из спектра Фурье можно оценить собственную частоту ДБ, которая составляет 8 ГГц, отметим, что эта частота определяется начальным отклонением намагниченности. При учете диссипации происходит постепенное уменьшение частоты ДБ, сопровождающееся увеличением амплитуды колебаний компонент M_x и M_y . Качественное изменение в поведении системы наблюдается в момент времени около 3 нс. Тогда осцилляции намагниченности в плоскости xu сменяются осцилляциями в плоскости uz , т.е. стандартными магнетонными колебаниями около равновесного состояния. Компонента M_x при этом релаксирует к равновесному состоянию $M_x = 1$. В спектре Фурье можно отметить широкую полосу частот колебаний, соответствующую плавному уменьшению частоты колебаний ДБ и пик на частоте 2.5 ГГц в спектре M_y , отсутствующий в спектре M_x , который соответствует частоте линейных магнонов в цепочке.

Увеличение размерности системы (2D — решетки магнитных наночастиц) открывает возможности для существования нелинейных состояний, связанные с разнообразием симметрии решеток и возможностью существования топологически защищенных состояний в таких системах.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ, проект № 22-19-00355.



Захват магнитного поля сверхпроводящим цилиндром

И. В. Бычков¹, Д. А. Кузьмин¹,
И. В. Мальцев¹, В. Г. Шавров²

¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

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

bychkov@csu.ru

Высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) — это материалы, которые имеют большие перспективы для использования в различных областях науки и техники. Они вызывают большой интерес благодаря своей способности проводить токи высокой плотности без потерь энергии на сопротивление и удерживать сильные магнитные поля. На основе ВТСП создают магниты для электродвигателей, магнитно-резонансных томографов, устройств магнитной левитации (например, поездов на магнитной подушке Maglev и бесконтактных подшипников), ускорителей частиц и других приборов. Из ВТСП обычно изготавливают ленты или объёмные элементы материала. У каждой формы есть своя область применения.

Ранее, особенности распределения магнитного поля возле образцов ВТСП прямоугольной формы исследовалось в работах [1–3]. В настоящей работе исследуется распределение и временная эволюция магнитного поля вблизи сверхпроводящего цилиндра.

Рассмотри цилиндр, изготовленный из ВТСП, высотой l , внутренним радиусом R_1 и внешним радиусом R_2 . Пусть этот цилиндр помещен во внешнее магнитное поле $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$, где ось z совпадает с осью цилиндра. Предположим, что в момент времени $t = 0$ внешнее магнитное поле «выключили», необходимо рассчитать каким будет распределение внешнего магнитного поля в пространстве и времени $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$. Удобно перейти в цилиндрическую систему координат.

Для решения поставленной задачи необходимо решить уравнения Максвелла внутри и вне цилиндра:

$$\begin{aligned}\partial E_{\varphi} / \partial z &= \partial B_r / \partial t, \\ r^{-1} \partial (r E_{\varphi}) / \partial r &= -\partial B_z / \partial t, \\ J_{\varphi} &= \mu_0^{-1} (\partial B_r / \partial z - \partial B_z / \partial r),\end{aligned}$$

где B_r и B_z — радиальные и аксиальные компоненты магнитной индукции, J_{φ} и E_{φ} — плотность тока и индуцируемое электрическое поле.

Для учета особенностей сверхпроводящего материала необходима также вольт-амперная характеристика образца. Ее обычно записывают в виде сильно нелинейного степенного закона:

$$E_{\varphi} = E_c (J_{\varphi} / J_c)^n$$

Вне сверхпроводника можно применить закон Ома в обычной форме: $E_{\varphi} = \rho_{\varphi} J_{\varphi}$, где ρ_{φ} — удельное сопротивление непроводящей среды. На границе сверхпроводника и немагнитной области задается условие непрерывности нормальной компоненты вектора магнитной индукции.

Решение системы уравнений проводилось численно. Рассчитаны распределение индукции магнитного поля вблизи ВТСП цилиндрической формы. Показано, что поле медленно убывает с течением времени как $B \sim t^{-1/2}$. Максимального значения поле достигает в центре цилиндра.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ, проект № 20–19–00745.

[1] В. М. Smolyak, G. V. Ermakov, M. S. Zakharov, *J. Supercond. Nov. Magn.*, **24** (2011) 325.

[2] В. М. Smolyak, M. S. Zakharov, *Supercond. Sci. Technol.*, **25** (2015). 125019.

[3] М. S. Zakharov, В. М. Smolyak, *J. Supercond. Nov. Magn.*, **28** (2015) 619.



Возбуждение поверхностных плазмон-поляритонов точечным источником в металлическом нанорезонаторе

М. А. Загребина, Д. А. Кузьмин, И. В. Бычков

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
m.zagrebina@list.ru

Поверхностные плазмон-поляритоны (ППП) — электромагнитные возбуждения в оптическом диапазоне, распространяющихся в тонком слое на границе раздела металл-диэлектрик.

В работе исследуется возбуждение ППП точечным источником электромагнитного излучения в наноструктуре, представляющей собой прямоугольник, выделенный на поверхности металла на границе раздела сред металл-диэлектрик, на основе дискретной модели волнового поля $u(x, y, t + 1)$ в двумерной области, взаимодействующей с точечным источником излучения [1]

$$\begin{aligned} u(x, y, t + 1) &= a_1 u(x, y, t) - a_2 u(x, y, t - 1) + bW(t, x \pm 1, y \pm 1) + gF(x, y, t), \\ W(t, x \pm 1, y \pm 1) &= u(x - 1, y, t) + u(x + 1, y, t) + u(x, y - 1, t) + u(x, y + 1, t) \end{aligned} \quad (1)$$

Функция (1) определяет состояние волнового поля в точке с координатами x, y в момент времени t ; x, y, t изменяются дискретно; g — коэффициент связи волнового поля с источниками излучения. Коэффициенты $a_1 = 2(2v^2 - 1)e^{-\gamma}$, $a_2 = e^{-2\gamma}$, $b = v^2 e^{-\gamma}$ определяют связь дискретной модели с фазовой скоростью волны v .

Действие на поле точечного источника, расположенного в точке $(x_0; y_0)$, определяется выражением, где $z(t)$ — функция, описывающая динамику точечного источника излучения

$$F(x, y, t) = \delta(x - x_0)(y - y_0)z(t). \quad (2)$$

Распределения волнового поля в наноструктуре были получены при учете макроскопической поляризации электронов плазменного слоя металла во внешнем электрическом поле. Численное моделирование показало, что в нанорезонаторе при учёте макроскопической поляризации с увеличением коэффициента связи волнового поля с источниками излучения действие точечного источника оказывается преобладающим, а расположение точечного источника

Параметризация модели дислокационной пластичности для алюминиевых сплавов с использованием машинного обучения

Е. С. Родионов, В. Г. Лупанов, В. В. Погорелко, А. Е. Майер,
П. Н. Майер, А. Я. Черепанов

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
rodionoves.pgd@gmail.com

Автоматизация поиска оптимальных параметров модели материала является актуальной задачей, поскольку позволяет существенно сократить время калибровки численной модели, а также повысить точность подбора коэффициентов. Физически обоснованные модели пластичности, параметризованные под конкретный материал являются фундаментом для создания инженерных и военных приложений. Их преимуществом является тот факт, что в отличие от эмпирических моделей при изменении исходной структуры материала нет необходимости снова подбирать коэффициенты модели. Модель дислокационной пластичности [1] позволяет учитывать такие микромеханические параметры, как плотность подвижных и неподвижных групп дислокаций, их образование и аннигиляцию, а также описывать микроструктурные изменения в металлах в процессе пластической деформации.

Обучение модели проводится по наборам экспериментальных данных. Проведены тесты Тейлора по высокоскоростному соударению классических цилиндров, а также профилированных образцов (рис. 1), позволяющих достигать больших пластических деформаций и разрушения ударников. Эксперименты проведены для сплавов алюминия АД31 (6063), 7075, В95Т1 и Д16Т. Для численного моделирования используется модель дислокационной пластичности, реализованная в трехмерной постановке с помощью метода гидродинамики сглаженных частиц (SPH) [2]. Для параметризации модели дислокационной пластичности используется современный подход машинного обучения [3], сочетающий искусственные нейронные сети в качестве эмулятора трехмерной

Уравнение состояния смеси кальцита с водой при высоких давлениях и температурах

Н. Н. Середкин¹, К. В. Хищенко^{1,2,3}

¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

³Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

nikser12@yandex.ru

В настоящей работе представлена модель термодинамики двух-компонентной смеси кальцита (CaCO_3) и воды (H_2O) в широком диапазоне давлений и температур.

Модель основывается на уравнениях состояния для компонентов этой смеси (CaCO_3 и H_2O) в форме функций удельной внутренней энергии и давления от удельного объема и температуры. Полагается, что компоненты смеси находятся в тепловом и механическом равновесии друг с другом (компоненты имеют одинаковые температуру и давление), и удельная энергия Гиббса смеси является суммой удельных энергий Гиббса компонентов, умноженных на соответствующие массовые доли.

В работе проводится сопоставление ударных адиабат, рассчитанных на основе этой модели для компонентов и смеси, с имеющимися экспериментальными данными по ударной сжимаемости рассматриваемых материалов. Предложенные уравнения состояния могут использоваться для замыкания системы уравнений движения среды в численном моделировании ударно-волновых процессов при высоких давлениях и температурах.

и переменных. Приводятся примеры построения уравнений состояния конкретных простых веществ (алюминий, железо) и химических соединений (полистирол) при высоких плотностях энергии. Результаты расчетов термодинамических характеристик рассматриваемых материалов сопоставляются с имеющимися данными из динамических экспериментов по измерению параметров плазмы при высоких давлениях и температурах.

Представленные термодинамические модели могут быть использованы при решении задач описания нестационарных процессов в плазме, которая образуется при интенсивных импульсных воздействиях на вещество.



Теоретическое исследование МГД-истечений из молодых звездных объектов

А. С. Балдина¹, К. С. Мезенцева¹, С. А. Хайбрахманов^{1,2}

¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

²Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

alina.baldina30@gmail.com

Аккреционные диски молодых звезд играют важную роль в формировании звезд и планет. Изучение истечений из этих дисков позволяет определить их влияние на процесс переноса углового момента в дисках и исследовать крупномасштабное магнитное поле дисков [1]. Поэтому актуальной задачей является систематический анализ характеристик наблюдаемых истечений и их сравнение с предсказаниями существующих моделей.

В настоящей работе выполнена систематизация данных о скоростях истечений и темпах оттока массы для ряда молодых звездных объектов (МЗО). Для анализа использованы наблюдательные данные в различных диапазонах длин волн (оптическом, инфракрасном, радио) для выборки из 12 МЗО с определенными характеристиками истечений [1–3]. На основе собранных данных выполнен анализ следующих характеристик: координата альвеновской точки, радиус точки начала истечения и установившаяся скорость истечения. Выполнено сравнение характеристик, определенных из наблюдений, с предсказаниями существующих моделей образования истечений из аккреционных дисков [4; 5]. Кроме того, для исследования физики истечений разработана одномерная численная МГД-модель истечений, образующихся за счет механизма Учиды и Шибаты [6]. Модель основана на решении уравнений одномерной идеальной МГД разностной схемой Лакса-Вендроффа в применении к вращающемуся геометрически тонкому диску в поле тяжести. Структура диска задается в соответствии с оригинальной МГД-моделью Дудорова и Хайбрахманова (см. [7]).

Результаты исследования показали, что в рассмотренных объектах скорости истечений варьируются в широком диапазоне от сотен километров в секунду в ближайших к центру частях диска

до 10 км/с или ниже на более удаленных областях. Полученные результаты согласуются с предсказаниями МГД-моделей истечений.

Работа С. А. Хайбрахманова выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 23-12-00258).

[1] S. Khaibrakhmanov, *Astron. Astrophys. Trans*, **34** (2024) arXiv:2401.14180.

[2] Labdon A., *Astron. Astrophys.*, **678** (2023) arXiv:2306.06240.

[3] Lada C. J., Kylafis N. D. (ed.), *Astrophys Space Sci.*, **206**(1993) 317–318.

[4] Pudritz R. E. et al., *Protostars and Planets V.*, **277** (2007) arXiv:astro-ph/0603592

[5] Ray T. P. et al., *Nature*, **622** (2023) 48–52.

[6] Y. Uchida, K. Shibata, *Publ. Astron. Soc.*, **37** (1985) 515–535.

[7] С. А. Хайбрахманов, А. Е. Дудоров, *Астрон. Ж.*, **99** (2022) 832–846.



от соотношения между внутренними магнитными натяжениями и внешним давлением.

Анализ расчетов позволяет сделать вывод, что образование и всплытие МСТ является эффективным механизмом отвода избыточного магнитного потока из областей эффективной генерации тороидального магнитного поля. Всплытие МСТ может влиять на генерацию струйных истечений и обуславливать наблюдаемые неоднородности струй из молодых звездных объектов. Трение между вращающимися МСТ и окружающим газом может быть дополнительным источником перераспределения углового момента в аккреционных дисках.

Работа С. А. Хайбрахманова выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 23-12-00258).

[1] S. Khaibrakhmanov, *Astron. Astrophys. Trans.*, **34** (2024) arXiv:2401.14180.

[2] S. Khaibrakhmanov, A. Dudorov, A. Sobolev, *Res. Astron. Astrophys.*, **18** (2018) 90–98.

[3] A. E. Dudorov, S. A. Khaibrakhmanov, A. M. Sobolev, *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, **487** (2019) 5388–5404.

[4] Н. В. Бартая, С. А. Хайбрахманов, *Науч. Труды ИНАСАН.*, **8** (2023) 119–123.

[5] С. А. Хайбрахманов, А. Е. Дудоров, *Астрон. Ж.*, **99** (2022) 832–846.



Нейросетевой потенциал и тензорное уравнение состояния для Al и Cu.

Б. А. Панченко, А. Е. Майер

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
kajie4@gmail.com

При исследовании деформации металлов широко применяются метод молекулярной динамики (МД), в котором для учёта взаимодействия атомов используются межатомные потенциалы. Чаще всего потенциал представляет собой аналитическое выражение [1]. Одной из альтернатив такому подходу является замена аналитического выражения на структуру, полученную с помощью машинного обучения. Широкое распространение получил нейросетевой подход [2].

При моделировании методами механики сплошных сред уравнение состояния (УРС) можно назвать аналогом межатомного потенциала. В случае высокоскоростной деформации необходим учет нелинейной связи тензоров напряжений и деформации, т. е. необходимо построение тензорного уравнения состояния. В нашей работе учет нелинейной связи осуществляется с помощью искусственной нейронной сети (ИНС).

Данные для обучения потенциала и холодной кривой УРС были получены с помощью метода теории функционала плотности. Было рассчитано по 1200 случайных трёхосных деформированных состояний для каждого металла, 350 суперячеек для Al-Cu структура, 350 суперячеек для каждого металла. Расчеты осуществлялись пакетом Quantum ESPRESSO [3], с использованием псевдопотенциалов SSSP PBE Efficiency v1.3.0 [4]. Для оценки теплового вклада в УРС, были проведены МД расчеты, объемно деформированные структуры нагревались последовательно от 300 К до 900 К, с шагом в 200 К. Для МД расчетов использовался программный пакет LAMMPS [5].

Потенциал обучался с помощью пакета n2p2 [6] и показал хорошую сходимость на валидационных данных, не использованных при обучении, был применен в качестве потенциала в пакете

LAMMPS. ИНС для УРС обучалась модифицированным методом градиентного спуска, метод опробован в предыдущих работах [7]. В качестве функции потерь использовалась перекрестная энтропия, эффективность такого подхода обоснована в [8]. ИНС в качестве холодной кривой показала хорошую эффективность прогнозирования на валидационных данных, среднеквадратичное отклонение составило 0.12 %. Для теплового вклада были вычислены температурные коэффициенты. Удельная теплоемкость меди и алюминия хорошо соответствует известному из статистической физики выражению (три колебательные степени свободы на каждый атом). Полученное тензорное уравнение было применено для расчета ударных адиабат пластической ударной волны (всестороннее сжатие) и упругой ударной волны (одноосное сжатие).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 20-11-20153-П, <https://rscf.ru/project/23-11-45024/>.

- [1] F. Apostol, Y. Mishin, *PRB*, **83** (2011) 054116.
- [2] J. Behler, M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.*, **98** (2007) 146401
- [3] P. Giannozzi et al., *JPCM*, **21** (2009) 395502
- [4] E. Bosoni et al., *Nat. Rev. Phys.*, **6**(2024) 45–58.
- [5] S. Plimpton, *J. Comput. Phys.*, **117**(1995) 1–19.
- [6] A. Singraber et al., *J Chem Theory Comput*, **15** (2019) 3075–3092.
- [7] N. A. Gracheva, M. V. Lekanov, A. E. Mayer, E. V. Fomin, *Mech. Solids*, **56** (2021) 326–342.
- [8] V. V. Pogorelko, A. E. Mayer, E. V. Fomin, E. V. Fedorov, *Int. J. Mech. Sci.*, **265** (2024) 108912.



Пластичность в нанокристаллическом алюминии с сегрегированной на границах зерен медью: атомистическое исследование, машинное обучение и континуальное моделирование

В. С. Красников, П. А. Безбородова,
Д. С. Воронин, А. Е. Майер

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
vas.krasnikov@gmail.com

Исследование включало атомистическое исследование, обобщение данных атомистического исследования с помощью искусственной нейронной сети (ИНС) и континуальное моделирование динамики макрообъема вещества с использованием метода сглаженных частиц, описывающего упругопластический отклик вещества с помощью построенной ИНС. Исследованы малоугловые границы $\Sigma 99a(110)$ Al и большеугловые границы $\Sigma 9(110)$ Al. Проведенное молекулярно-динамическое (МД) исследование показало, что механизмы упругопластического перехода в нанокристаллическом алюминии существенно зависят от концентрации сегрегированных на ГЗ атомов меди. Изменение механизмов активации пластического течения с ростом концентрации сегрегированных атомов меди сопровождается немонотонным изменением критического напряжения упругопластического перехода.

Искусственная нейронная сеть (ИНС) используется для аппроксимации механизмов механического отклика и пластической деформации для описания поведения ГЗ, которое сложным образом зависит от концентрации меди на ГЗ и предыдущей истории деформации. Предложенная ИНС описывает величины упругой и пластической деформации, количество дефектных атомов и угол поворота зерна. Сравнение результатов ИНС с данными МД, не использованными при обучении ИНС, демонстрирует хорошее количественное согласие соотношений деформация-напряжение и адекватно

отражает механизмы пластической деформации. Использование ИНС позволяет за короткое время получить непрерывные зависимости от концентрации атомов меди для кривых деформация-напряжение, доли дефектных атомов и пластической деформации, обеспечиваемой поворотом зерен. С помощью ИНС установлены границы областей концентрации меди, в которых пластическая релаксация происходит в основном за счет поворота зерен, что приводит к уменьшению количества дефектов в объеме зерен, что позволяет говорить о повышенной стойкости таких нанокристаллических образцов к длительной деформации.

Для описания механических свойств макрообъемов нанокристаллического алюминия с сегрегированными на ГЗ атомами меди обученная ИНС используется для описания упругопластических свойств вещества в методе сглаженных частиц. Решение уравнений механики сплошной среды с использованием данной методики позволило моделировать пластическую деформацию микростолбиков вещества, образованного из нанокристаллического алюминия.

Работа поддержана грантом РФФИ № 24-11-20031.



Исследование полуметаллических свойств сплава Гейслера FeMnVAI

К. Р. Ерагер, В. В. Соколовский, В. Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
eragerk@rambler.ru

С недавнего времени, после открытия полуметалличности в составе NiMnSb [1], сплавы Гейслера пользуются востребованностью с целью их применения в устройствах спинтроники. Четверные соединения Гейслера $XX'YZ$ (X, X' и Y — переходные металлы, а Z — элемент основной группы) играют важную роль в исследовательской области благодаря своим выдающимся физическим характеристикам, таким как низкое энергопотребление, стабильные полуметаллические и транспортные свойства.

В данной работе расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP [2; 3] в приближении функционала SCAN [4], который, как считается, повышает точность вычислений электронных свойств композиций. Кристаллические структуры были построены на базе 16-атомной элементарной ячейки с ферро- и ферримагнитным упорядочением магнитных моментов. Геометрическая оптимизация проводилась в рамках ионной релаксации с изменением позиций атомов, формы и объема ячейки. Интегрирование зоны Бриллюэна проводилось на Γ -центрированной k -сетке с плотностью ~ 5500 точек на атом обратной решетки.

По полученным данным, рассматриваемый сплав обладает отрицательной энергией формирования, что указывает на стабильность к распаду на составные элементы и механическую устойчивость. Значение магнитного момента предсказывается целочисленным, что удовлетворяет правилу Слейтера-Полинга и является первым критерием полуметалличности соединения. Что касается структурных свойств — стоит отметить, что кристаллическая решетка является кубической со степенью тетрагональности $c/a = 1$. Результаты расчетов электронных свойств подтверждают полуметаллическую природу данной кристаллической структуры демонстрируя

энергетическую щель в канале «спин вниз». Степень спиновой поляризации составляет 100 %, что также указывает на полуметалличность. Зонная структура демонстрирует энергетическую щель в «спин вниз» канале ~ 0.77 эВ на уровне Ферми, а также имеет металлическое поведение в канале «спин вверх». Из расчета зависимости энергии и магнитного момента от параметра решетки следует, что для структуры характерно наличие двух минимумов: глобального (низкомагнитное состояние) при параметре решетки $a = 5.69$ Å и локального (высокомагнитное состояние) при параметре решетки $a = 5.92$ Å с энергетической разницей между ними ~ 46.09 мэВ/атом. Так как минимум с меньшим магнитным моментом соответствует полуметаллическому состоянию, а минимум с высоким магнитным моментом — металлическому, это можно использовать для разработки настраиваемых спинтронных устройств с переключаемым поведением полуметалл — металл, и возможностью их дальнейшего применения в качестве спиновых фильтров, датчиков, переключателей и логических вентилях.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-12-20032.

[1] R. A. De Groot, F. M. Mueller, P.G. van Engen, K.H.J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.*, **50** (1983) 2024.

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

[3] G. Kresse, D. Joubert, *Phys. Rev. B.*, **59** (1999) 1758.

[4] J. Sun, A. Ruzsinszky, J. P. Perdew, *Phys. Rev. B.*, **115** (2015) 036402.



Применение методов машинного обучения для разработки определяющих уравнений пористых металлов

Ф. Т. Латыпов, П. А. Безбородова,
Е. С. Родионов, А. Е. Майер

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
latypovfanil@gmail.com

Работа направлена на создание определяющих уравнений пористых алюминия и меди с использованием методов машинного обучения. Для набора обучающих данных был применен метод гидродинамики сглаженных частиц (SPH) [1]. Метод SPH, применялся для решения базовых законов механики сплошных сред. С помощью этого метода было проведено моделирование одноосного и всестороннего сжатия пористых алюминия и меди на мезомасштабном уровне. Изучено влияние деформации сжатия на пористые алюминий и медь в широком диапазоне скоростей деформации и температур. Набор обучающих данных был получен в виде зависимостей диагональных компонент напряжений σ , давлений P , энергий W , температур T и текущей пористости ϕ , которые можно вычислить как функцию от текущей деформации ε , коэффициента формы поры Ψ , начальной температуры T_0 , исходной пористости ϕ_0 и скорости деформации $d\varepsilon/dt$.

Полученные наборы данных, SPH моделирования, были применены для определения коэффициентов (или обучения) искусственной нейронной сети (ИНС) [2]. Обученная ИНС представляет собой аналог уравнения состояния, которое предсказывает поведение пористого алюминия или меди при их сжатии. ИНС обучалась методом обратного распространения ошибки с использованием пакетного градиентного спуска. Полученные прогнозы ИНС показали хорошее соответствие результатам SPH моделирования.

Также наборы данных, полученных SPH моделированием, были использованы для параметризации сформулированной физической модели, описывающей деформацию ячейки пористого алюминия и меди. Физическая модель учитывает изменение размера поры

и упругопластическую деформацию в материале окружающим пору. Для определения напряжений при текущих деформациях использован закон Гука и уравнение для пластической деформации на основе релаксационной модели Максвелла.

Оба подхода, основанные на машинном обучении, позволяют построить определяющие уравнения пористого алюминия и меди, которые могут применяться при макроскопическом моделировании процессов динамического уплотнения и ударно-волновых процессов в этих материалах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-71-01111, <https://rscf.ru/project/23-71-01111/>

[1] J. J. Monaghan, *Rep. Prog. Phys.*, **68** (2005) 1703–1759.

[2] P. Kidger, T. J. Lyons, *Proc. Mach. Learn. Res.*, **125** (2020) 1–22.



Влияние исходной плотности дислокаций на распространение ударной волны в чистом алюминии

П. А. Безбородова, В. С. Красников, А. Е. Майер

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
ibragimova-polin@mail.ru

В настоящее время большое внимание уделяется исследованию поведения материалов в экстремальных состояниях при ударно-волновом нагружении. В данной работе с помощью молекулярной динамики исследуется влияние начальной плотности дислокаций и массовой скорости частиц за фронтом УВ на особенности пластической деформации в алюминии. Рассматривались системы с идеальной решеткой и различной плотностью дислокаций (от $1 \cdot 10^{16}$ до $5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$).

УВ с массовой скоростью 1000 м/с в идеальном алюминии демонстрирует несколько стадий превалирования различных механизмов пластической релаксации. На начальном этапе (до 190 нм) основным механизмом является гомогенное зарождение дислокаций с последующим зарождением дислокаций в соседних плоскостях скольжения, что приводит к образованию двойников. На более поздних моментах релаксация в пластической части волны активируется за счет распространения уже существующих двойниковых прослоек.

В системе с начальными дислокациями на характер распространения волны накладывается пластическая релаксация, активирующаяся с приходом фронта УВ. В результате, на начальном этапе распространения УВ с повышением начальной плотности дислокаций происходит незначительное понижение максимального напряжения на пике упругого предвестника. Так же наблюдается тенденция к снижению плотности дислокаций, формирующихся на предвестнике, с ростом начальной плотности дислокаций, что позволяет сделать вывод о некотором снижении интенсивности гомогенного зарождения новых дислокаций. На поздних этапах наблюдается снижение величины напряжений на упругом предвестнике

и размытие пластического фронта, что приводит снижению интенсивности образования новых дислокаций с распространением волны.

Молекулярно-динамические (МД) расчеты проводились с использованием пакета LAMMPS [1]. Для описания межатомных взаимодействий в системе использовался EAM потенциал, предложенный [2].

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ рамках государственного задания № 075-00187-24-00.

[1] S. J. Plimpton, *J. Comp. Phys.*, **117** (1995) 1–19.

[2] Y. Mishin, D. Farkas, M. J. Mehl, *Phys. Rev. B.*, **59** (1999).



Влияние структурного беспорядка на магнитные свойства сплавов Fe-Ga: исследование *Ab initio*

М. В. Матюнина, М. А. Загребин, В. Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
miczag@csu.ru

Среди магнитоупорядоченных соединений можно выделить класс магнитострикционных материалов, которые находят свое применение в современных электронных устройствах и датчиках в качестве преобразователей электромагнитной энергии в механическую, и наоборот. Магнитострикционные сплавы Fe-Ga являются наиболее популярным объектом для исследования в последние два десятилетия. Сплавы Fe-Ga являются успешными магнитострикционными материалами, которые продемонстрировали два пика магнитострикции насыщения при комнатной температуре $\lambda_{001} = 395 \times 10^{-6}$ и 350×10^{-6} для составов с $x \approx 19$ ат.% и $x \approx 27$ ат.% соответственно [1]. Согласно экспериментальным результатам для сплава $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$ в диапазоне содержания атомов Ga от 0 до 10 ат.% фаза *A2* (группа симметрии *Im-3m*, № 229, прототип α -Fe) является преобладающей [2]. Кроме того, величина температуры Кюри T_C с ростом концентрации легирующего элемента в области твердого раствора *A2* демонстрирует необычное медленное снижение. В работе [3] данное поведение объяснялось существенным вкладом косвенного обменного взаимодействия между магнитными атомами железа, осуществляемое через коллективизированные электроны проводимости. В работе [4] обсуждалась другая точка зрения, согласно которой существенный вклад в концентрационную зависимость температуры T_C в сплавах Fe-Ga дают спиновые флуктуации. Однако эти гипотезы не получили подтверждения к настоящему времени. Целью данной работы является исследование влияния концентрации и расположения немагнитных атомов в решетке *A2* сплавов $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$ на энергию основного состояния, объем и магнитные моменты в рамках первопринципных методов.

Расчеты проведены в рамках теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [5, 6]. Геометрическая оптимизация кристаллической структуры A_2 , представляющей собой неупорядоченный сплав, проводилась при помощи 54-х атомных суперячеек, которые представляют собой набор $3 \times 3 \times 3$ ОЦК элементарных ячеек.

В результате проведенных исследований получено, что в зависимости от локализации атомов в расчетной ячейке, объем, рассчитанный на атом элементарной ячейки, может как увеличиваться, так и уменьшаться, что отражается на величине магнитного момента, приходящегося на атом Fe. Данное поведение может быть объяснено изменением расстояния между парами атомов Fe, вызванного расширением решетки. Полученные зависимости кривых величины магнитного момента, приходящегося на атом Fe, и изменения объема на атом элементарной ячейки идентичны друг другу.

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

[1] A. E. Clark et al., *J. Appl. Phys.*, **93** (2003) 8621.

[2] O. Kubaschewski, *Iron-binary phase diagrams*. Berlin: Springer-Verlag, 1982.

[3] G. P. Huffman, *AIP Conference Proceedings*, **5** (1972) 1310.

[4] A. K. Arzhnikov et al. *J. Exp. Theor. Phys.*, **83** (1996) 623.

[5] G. Kresse et al., *Phys. Rev. B.*, **54** (1996) 11169.

[6] G. Kresse et al., *Phys. Rev. B.*, **59** (1999) 1758.



Содержание

<i>Грешняков В. А.</i> Алмазоподобные соединения с клатратной структурой	3
<i>Матюнина М. В., Байгутлин Д. Р., Соколовский В. В., Бучельников В. Д.</i> Термоэлектрические свойства сплавов Гейслера на основе щелочных металлов	5
<i>Новокрещенов Д. В., Соколовский В. В.</i> Влияние атомного упорядочения на магнитную анизотропию и динамическую устойчивость сплавов Гейслера Fe_2CoZ ($Z = Al, Ga, In, Si, Ge, Sn$)	7
<i>Павлухина О. О., Соколовский В. В., Бучельников В. Д.</i> Исследование структуры и свойств сплавов $FeRhSn_{1-x}Z_x$ ($Z = Pb, Ge$)	9
<i>Фролова Д. А., Бучельников В. Д.</i> Термоэлектрические свойства сплавов Li_2CsSb и Li_2RbBi	11
<i>Абдрахманов Д. И., Шарафуллин И. Ф.</i> Влияние обменно-редуцированного дефекта на взаимодействие скирмионов в магнитных пленках	13
<i>Муртазаев А. К., Атаева Г. Я., Бабаев А. Б.</i> Исследование пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке методом Монте-Карло в чистом и разбавленном режимах	15
<i>Дроворуб Е. В., Прудников П. В.</i> Моделирование методами Монте-Карло магнитных свойств спин-вентильных наноструктур	17
<i>Курбанова Д. Р., Муртазаев А. К., Магомедов М. А., Рамазанов М. К.</i> Влияние конкурирующих взаимодействий на фазовые переходы в антиферромагнитной модели Поттса на ОЦК-решетке	19
<i>Мазагаева М. К., Муртазаев А. К., Рамазанов М. К., Магомедов М. А.</i> Антиферромагнитная модель Поттса во внешнем магнитном поле	21
<i>Муртазаев К. Ш., Магомедов М. А., Муртазаев А. К., Рамазанов М. К., Джамалудинов М. Р.</i> Фазовые переходы в модели Изинга с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей во внешнем магнитном поле	23



<i>Мутайламов В. А., Муртазаев А. К.</i> Фазовая диаграмма и основное состояние ферромагнитной декорированной модели Изинга на треугольной решетке с антиферромагнитным взаимодействием вторых ближайших соседей	25
<i>Нугуманов А. Г., Шарафуллин И. Ф.</i> Нуклеация и переключение скирмионов под действием упругих деформаций и магнитного поля	27
<i>Нугуманов Р. Р., Магадеев Е. Б., Шарафуллин И. Ф.</i> Квазиоднородные магнитные структуры в ограниченных двухслойных пленках	29
<i>Рамазанов М. К., Муртазаев А. К.</i> Фазовые переходы в модели Изинга с фрустрациями	31
<i>Ризванова Т. Р., Рамазанов М. К., Муртазаев А. К., Магомедов М. А.</i> Исследование двумерной антиферромагнитной модели Поттса на решетке кагOME	33
<i>Тааев Т. А., Хизриев К. Ш., Муртазаев А. К.</i> Микромагнитное моделирование магнитных систем	35
<i>Колесников В. В., Мурзаев Р. Т., Баимова Ю. А.</i> Исследование теплопроводности графинов методом молекулярной динамики	37
<i>Мионов Р. А., Мурзаев Р. Т., Баимова Ю. А.</i> Исследование влияния фуллерена C ₆₀ на теплопроводность меди методом молекулярной динамики	39
<i>Полякова П. В., Мурзаев Р. Т., Баимова Ю. А.</i> Исследование влияния хиральности на механические свойства диамана: атомистическое моделирование	41
<i>Сафина Л. Р., Крылова К. А., Баимова Ю. А.</i> Влияние взаимодействия Ni и Cu с графеном на механические свойства композита графен/металл: атомистическое моделирование	43
<i>Тувалев И. И., Мурзаев И. И.</i> Композит графенового аэрогеля и никеля: молекулярная динамика	45
<i>Тузев Д. А., Назмутдинов Р. Р.</i> Молекулярное моделирование полиоксометаллатов в водном растворе и на межфазной границе металл/раствор	47



<i>Красников В. С., Безбородова П. А., Воронин Д. С., Майер А. Е.</i>	
Пластичность в нанокристаллическом алюминии с сегрегированной на границах зерен медью: атомистическое исследование, машинное обучение и континуальное моделирование	71
<i>Ерагер К. Р., Соколовский В. В., Бучельников В. Д.</i>	
Исследование полуметаллических свойств сплава Гейслера FeMnVAl	73
<i>Латыпов Ф. Т., Безбородова П. А., Родионов Е. С., Майер А. Е.</i>	
Применение методов машинного обучения для разработки определяющих уравнений пористых металлов	75
<i>Безбородова П. А., Красников В. С., Майер А. Е.</i>	
Влияние исходной плотности дислокаций на распространение ударной волны в чистом алюминии	77
<i>Матюнина М. В., Загребин М. А., Бучельников В. Д.</i>	
Влияние структурного беспорядка на магнитные свойства сплавов Fe-Ga: исследование Ab initio	79

