

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
ОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. Ф.М. ДОСТОЕВСКОГО

ФМХ ОмГУ 2023

**СБОРНИК СТАТЕЙ
XI РЕГИОНАЛЬНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МАГИСТРАНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
ПО ФИЗИКЕ, МАТЕМАТИКЕ И ХИМИИ
(Омск, 5–20 июня 2023 г.)**

© ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», 2023

ISBN 978-5-7779-2639-5

Омск
Издательство ОмГУ
2023

УДК 53+51
ББК 22.3я43+22.1я43
Ф114

Рецензенты:

канд. биол. наук М.Г. Потуданская,
канд. физ.-мат. наук С.А. Сычев

Ответственные редакторы:

Ю. В. Захарова, Г. М. Серопян

Ф114 ФМХ ОмГУ 2023: сборник статей XI региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике, математике и химии (Омск, 5 июня – 20 июня 2023 г.). – Омск : Издательство Омского государственного университета, 2023. – 1 CD-ROM. – Загл. с титул. экрана.

ISBN 978-5-7779-2639-5

В сборнике опубликованы статьи участников конференции, посвященные исследованиям в области математического моделирования, дискретной оптимизации, информационных технологий, прикладной теоретической физики, экспериментальной физики, химии и химической технологии.

Для молодых ученых, магистрантов, аспирантов физико-математических и химических специальностей и направлений.

УДК 53+51

ББК 22.3я43+22.1я43

*Текстовое электронное издание
Самостоятельное электронное издание*

Минимальные системные требования:
процессор с частотой 1,3 ГГц или выше; ОЗУ 512 Мб;
Microsoft Windows XP/Vista/7/8/10;
Adobe Acrobat Reader 8.0 и выше; CD-ROM; мышь

© ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», 2023

СОДЕРЖАНИЕ

Организационный комитет	7
Секция «ПРИКЛАДНАЯ ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»	
<i>И.К. Сайфутдинов</i> Исследование особенностей неравновесного поведения мультислойных наноструктур с намагниченностью перпендикулярной плоскости пленок.....	8
<i>А.Е. Голота</i> Исследование особенностей скейлингового поведения сложных спиновых моделей методами машинного обучения	13
<i>Е.В. Дроворуб</i> Моделирование поведения и расчет магнитных характеристик спин-вентильных наноструктур	17
<i>А.В. Минькова</i> Исследование магнитных свойств кирального гелимагнетика CrNb_3S_6	21
<i>С.С. Михеев</i> Исследование ферромагнитной структуры $\text{Pd}_{1-x}\text{Co}_x$ при малой концентрации кобальта	25
<i>Д.И. Поликовская</i> Численные методы адсорбции фурфурола на палладии в водной среде.....	29
<i>Р.А. Сухачев</i> Исследование проявления эффектов магнитной анизотропии в системе $\text{Co}/\text{Cu}/\text{Co}$ в рамках первопринципного подхода метода функционала спиновой плотности	32
<i>В.В. Хитринцева</i> Моделирование неравновесной критической динамики трехмерной модели Гейзенберга с сильной одноосной анизотропией.....	36
<i>Е.И. Хорошев</i> Предсказание критического поведения низкоразмерных неупорядоченных систем сверточной нейросетью	40
<i>Е.К. Черноок</i> Исследование туннельного магнитосопротивления методами Монте-Карло.....	44

<i>А.А. Чубарова</i> Исследование универсальных свойств критического поведения спиновых систем с применением методов машинного обучения.....	48
<i>А.А. Чубарова</i> Исследование кристаллической структуры Fe ₁ /3TiS ₂ с использованием эволюционных алгоритмов	52
<i>Г.В. Шароглазов</i> Первопринципные расчеты магнитных свойств сплава CoPt.....	56
<i>А.Е. Егорина</i> Моделирование методом Монте-Карло магнитных свойств спин-вентильных наноструктур.....	60
<i>Ю.К. Евстафьева</i> Особенности проявления медленной динамики в магнитосопротивлении спин-вентильных наноструктур.....	64
<i>Р.С. Шакиров</i> Исследование влияния точечных типов дефектов на эффекты гистерезиса в мультислойных наноструктурах	68
<i>Л.А. Грязнов</i> Численное моделирование спиновых стёкол с РККИ взаимодействием	72

Секция «ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА»

<i>А.Ю. Куклев</i> Измерение пьезомодуля пленок нитрида алюминия на основе прямого пьезоэффекта	75
<i>А.Р. Сайтбагина</i> Исследование содержания основных компонентов в молоке высокочастотным импедансным методом	79
<i>А.А. Воронина</i> Исследование взаимодействия лазерного излучения с титанатом стронция	83
<i>А.С. Калита</i> ARMA-оптические фильтры с максимально плоскими передаточными функциями	87
<i>Е.Е. Нисневич</i> Исследование зависимости критической температуры перехода сверхпроводящего купрата YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x} при замещении свинцом бария.....	91

<i>Д.С. Сидоренко</i> Исследование влияния интенсивности лазерного излучения на морфологию поверхности напыляемой УВСО плёнки.....	95
<i>Т.В. Черникова</i> Влияние облучения мощным ионным пучком на окисление поликристаллического магния.....	99
<i>А.В. Касьянова</i> Исследование влияния газовой атмосферы на низкотемпературный отжиг слоев поливинилена	103
<i>А.А. Александров</i> Векторная силовая микроскопия пьезоотклика индивидуальных фибрилл коллагена I типа	108
<i>П.Е. Шаранов</i> Орделение кислородного индекса в сверхпроводящем Купрате УВСО методом йодометрии	112
<i>П.А. Поляков</i> Воздействие мощного ионного пучка наносекундной длительности на хлорированные каучуки.....	117

Секция «ДИСКРЕТНАЯ МАТЕМАТИКА
И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ»

<i>Д.Е. Витютнев</i> Приближенный алгоритм кластеризации вершин графа с ограничением числа кластеров.....	121
<i>А.Л. Голованов</i> Методы аутентификации человека по клавиатурному почерку	125
<i>Ю.В. Захарова</i> О моделях целочисленного линейного программирования для задач составления расписаний на одной машине.....	128
<i>В.С. Каплун</i> Применение градиентного бустинга для прогнозирования физической работоспособности космонавтов	133
<i>С.А. Торубара</i> Планирование инвестиционных проектов при ограниченных финансовых ресурсах.....	137

Секция «СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ОБРАЗОВАНИЯ»

<i>А.М. Барановская</i> Выявление познавательных барьеров у студентов СПО в процессе обучения физике	141
<i>С.Н. Еремина</i> Практико-ориентированное обучение физике как способ развития познавательного интереса школьников	145
<i>О.А. Сенькова</i> Использование электронных программных средств при решении математических задач	149

Организационный комитет

<i>Сервах Владимир Вицентьевич</i>	д-р физ.-мат. наук, профессор, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С. Л. Соболева, профессор кафедры фундаментальной и прикладной математики ОмГУ
<i>Прудников Владимир Васильевич</i>	д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики ОмГУ
<i>Потуданская Мария Геннадьевна</i>	канд. биол. наук, доцент, декан физического факультета ОмГУ
<i>Голованова Ольга Александровна</i>	д-р геолого-минералогических наук, профессор, заведующий кафедрой неорганической химии ОмГУ
<i>Власова Ирина Васильевна</i>	д-р хим. наук, профессор, кафедры органической и аналитической химии ОмГУ
<i>Серолян Геннадий Михайлович</i>	канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры общей и экспериментальной физики ОмГУ
<i>Позыгун Ирина Станиславовна</i>	ст. преподаватель кафедры общей и экспериментальной физики ОмГУ
<i>Леванова Татьяна Валентиновна</i>	канд. физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН, доцент кафедры фундаментальной и прикладной математики ОмГУ
<i>Захарова Юлия Викторовна</i>	канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Омского филиала Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН, доцент кафедры фундаментальной и прикладной математики ОмГУ

Секция
«ПРИКЛАДНАЯ ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

**Исследование особенностей неравновесного поведения
мультислоистых наноструктур с намагниченностью
перпендикулярной плоскости пленок**

И. К. Сайфутдинов

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор В. В. Прудников

Аннотация. Осуществлено моделирование методами Монте-Карло магнитных свойств мультислоистой наноструктуры. Для описания свойств структуры применена анизотропная модель Гейзенберга с анизотропией типа «легкая» ось. Для структур с толщинами ферромагнитных пленок $N=3$ МС в двухвременной зависимости автокорреляционной функции выявлены эффекты старения, получено значение предельного флуктуационно-диссипативного отношения (ФДО).

Ключевые слова: метод Монте-Карло, магнитная наноструктура, неравновесное критическое поведение, эффекты старения, флуктуационно-диссипативное отношение.

Эффект гигантского магнитосопротивления (ГМС) [1] наблюдается в многослойных структурах, в которых ультратонкие магнитные слои (Fe, Co и др.) разделены немагнитными металлическими слоями (Cr, Cu, Ir) с толщиной в несколько нанометров. Толщина прослойки подбирается таким образом, чтобы взаимодействие между магнитными слоями было антиферромагнитным. За счет этого взаимодействия намагниченности соседних ферромагнитных слоев ориентируются противоположно друг другу. При помещении такой структуры во внешнее магнитное поле намагниченности слоев начинают ориентироваться параллельно, что приводит к значительному изменению электрического сопротивления. Эти искусственно созданные магнитные сверхрешетки представляют большой интерес для широкой области применений, основанных на явлениях гигантского магнетосопротивления (ГМС) и

туннельного магнетосопротивления (ТМС) в области спинтроники.

Исследование систем, характеризующихся медленной динамикой, в настоящее время вызывает значительный интерес [2]. Выявленные особенности неравновесной динамики могут служить основой для адекватной интерпретации экспериментальных данных, полученных для мультислойных структур [3].

В данной работе осуществлено моделирование методами Монте-Карло магнитных свойств трехплочной наноструктуры, состоящей из двух ферромагнитных пленок кобальта, разделенных пленкой немагнитного металла и связанных обменным взаимодействием, носящим антиферромагнитный характер. Для описания свойств такой структуры применена анизотропная модель Гейзенберга с анизотропией типа «легкая» ось, приводящей к ориентации спонтанной намагниченности перпендикулярно плоскости пленки. Магнитные свойства ультратонких пленок при контакте с подложкой из немагнитного металла описывается анизотропной моделью Гейзенберга, задаваемой гамильтонианом:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \{(1 - \Delta(N))(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z\}, \quad (1)$$

где $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор спина, зафиксированный в i -ом узле ГЦК-решетки пленки магнитного металла, $J_1 > 0$ – обменный интеграл, характеризующий обменное взаимодействие ближайших спинов пленки, $\Delta(N)$ – параметр анизотропии, зависящий от толщины N пленки в единицах монослоев. Моделирование проводилось для пленок с размерами $L \times L \times N$ и наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки. Значение обменного интеграла, определяющего взаимодействие соседних спинов внутри ферромагнитной пленки задавалось как $J_1/k_B T = 1$, взаимодействие между пленками – $J_2/J_1 = -0.1$.

В исследованиях неравновесного поведения систем с медленной динамикой выделяют высокотемпературные начальные состояния, созданные при начальных температурах $T_0 > T_c(N)$ и характеризующиеся начальной намагниченностью $m_0 = 0$,

а также низкотемпературные начальные состояния с $T_0 < T_c$ и $m_0 \neq 0$.

В работе было проведено моделирование неравновесного поведения мультислойной магнитной структуры при критической температуре. Были рассмотрена структура с $N = 3$ МС (монослоев). По рассчитанной размерной зависимости кумулянта Биндера 4-го порядка для линейных размеров $L = 32, 48, 64$ определена критическая температура $T_c = 2.6310(15)$ структуры.

При данном значении T_c были рассчитаны временная зависимость "шахматной" намагниченности $m_{stg}(t)$ (рис. 1, слева) с эволюцией из низкотемпературного состояния, двухвременная автокорреляционная функция $C(t, t_w)$ (рис. 1, справа) и динамическая восприимчивость $\chi(t, t_w)$ с эволюцией из высокотемпературного начального состояния.

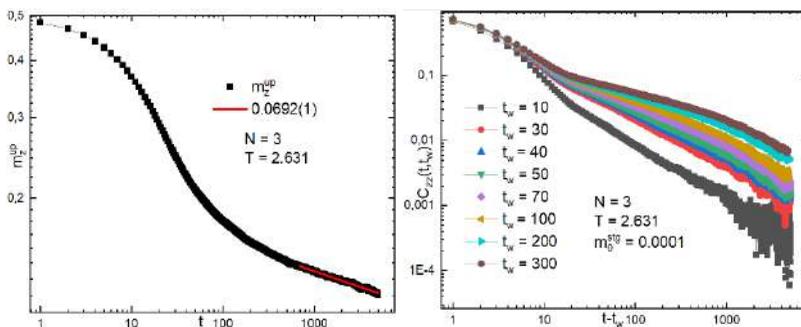


Рисунок 1. Временная зависимость "шахматной" намагниченности (слева) и автокорреляционной функции (справа) структуры с толщинами $N = 3$ МС ферромагнитных пленок, построенные в двойном логарифмическом масштабе.

Анализ критической релаксации намагниченности позволил определить значение критического показателя $\beta/\nu z = 0.0692(1)$, соответствующее значению для двумерной модели Изинга. В поведении автокорреляционной функции наблюдаются эффекты старения – замедление спада с ростом времени ожидания t_w . Исследование двухвременной зависимости

динамической восприимчивости также выявили аналогичные эффекты старения.

Важным проявлением медленной динамики системы служит нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы, когда связь функции отклика системы на внешнее возмущение $R(t, t_w)$ и корреляционной функции $C(t, t_w)$ осуществляется через введение дополнительной величины $X(t, t_w)$, получившей название флуктуационно-диссипативного отношения (ФДО) [2] и являющейся универсальной характеристикой неравновесных процессов в различных системах. При использовании интегральной характеристики функции отклика - динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$, ФДО может быть определено соотношением [2]

$$X(t_w) = \lim_{c \rightarrow 0} \frac{T_c \partial \chi(t, t_w)}{\partial C(t, t_w)}. \quad (2)$$

В работе проведен расчёт ФДО для наноструктуры с $N = 3$ МС при эволюции из высокотемпературного начального состояния. Была построена параметрическая зависимость динамической восприимчивости от автокорреляционной функции (рис.2), которая позволила по асимптотической кривизне определить значения ФДО для t_w , а затем путем экстраполяции $X(t_w \rightarrow \infty)$ вычислить предельное значение ФДО $X^\infty = 0.340(7)$, близкое к ФДО для двумерной модели Изинга.

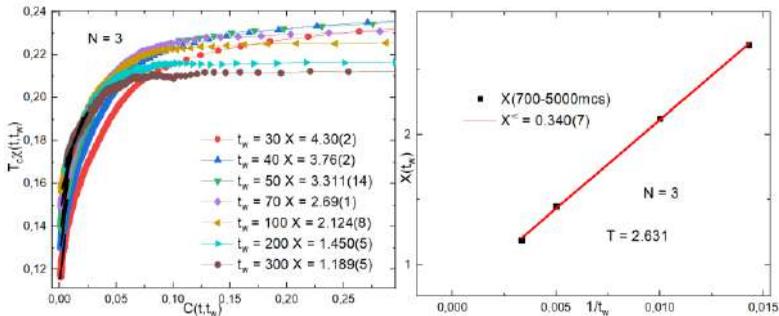


Рисунок 2. Параметрическая зависимость динамической восприимчивости от автокорреляционной функции при эволюции из высокотемпературного начального состояния.

Исследования поддержаны РФФ, проект 23-22-00093.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Parkin S.S.P.* // *Ann. Rev. Mater. Sci.*, **25**, 357–388 (1995).
- [2] *Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В.* // *УФН.* **187**.
№ 8, 817-855 (2017).
- [3] *Mukherjee T., Pleimling M., Vinek Ch.* // *Phys. Rev.* **B82**, 134425 (2010).

Сайфутдинов Игорь Константинович, ОмГУ им. Ф. М. Достоевского,
кафедра теоретической физики, 2-й курс аспирантуры.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787. skyfallsheild@gmail.com

Исследование особенностей скейлингового поведения сложных спиновых моделей методами машинного обучения

А. Е. Голота

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор П. В. Прудников.

Аннотация. Представлены результаты расчетов критической температуры трёхмерной модели Изинга. При помощи свёрточных нейронных сетей была найдена точка фазового перехода второго рода. Свёрточная нейронная сеть была построена на основе готовых решений комплексной платформы машинного обучения «Tensorflow».

Ключевые слова: Свёрточная нейронная сеть, обучение с учителем, моделирование системы, Tensorflow, трёхмерная модель Изинга.

В последние годы нейронные сети стали достаточно перспективным и актуальным инструментом для решения большинства вычислительных задач. Благодаря способности нейронных сетей к обучению, можно однажды обучив нейронную сеть, получить огромный прирост к скорости исследования моделей со схожим поведением в области критической температуры, что говорит об огромном потенциале данного метода к исследованиям в области фазовых переходов.

На данный момент существует большое количество архитектур нейронных сетей, заточенных под совершенно различные задачи [1]. Одним из примеров являются автоэнкодеры [2], которые позволяют восстанавливать 3D объекты из изображений, а также свёрточные нейронные сети, которые могут определить температуру фазового перехода двумерных спиновых систем [3].

Целью данной работы является проверка применимости нейронных сетей к предсказанию температуры фазового перехода трёхмерной модели Изинга.

При моделировании системы Изинга посредством метода односпинового переворота (алгоритма Метрополиса) на каждом температурном шаге по истечению шагов на релаксацию, из спиновой решетки по корреляционной формуле составлялись корреляционные матрицы, которые отлично описывают

внутрисистемные взаимодействия. Их наличие обусловлено большей вариативностью входных значений, что благоприятно влияет на обучаемость нейронной сети.

В качестве инструмента для исследования системы применялась трёхмерная модель свёрточной нейронной сети для задач классификации, заточенная под распознавание образов. Трёхмерность модели свёрточной нейронной сети подразумевает наличие трёхмерных свёрточных слоёв, состоящих из фильтров, которые посредством скольжения по трёхмерным массивам данных и их последующего преобразования, выделяют основные признаки исследуемого объекта, что делает их незаменимым анализатором в случае сложной задачи классификации температуры фазового перехода.

Обучение данной нейронной сети происходило посредством размеченных данных. Основная особенность, выделенная для задач классификации, заключается во встроеной, в заключающем односвязном слое, функции softmax, которая преобразует итоговые данные, как вероятность отношения входных данных к тому или иному классу. Разметка данных для задачи классификации фазового состояния системы осуществлялась при помощи разделения обучающих данных по двум классам: до температуры фазового перехода и после температуры фазового перехода.

Параметры моделируемой системы: линейные размеры системы варьировались в диапазоне $L = [8, 16, 24, 32]$. Температурный диапазон $T = [3.2; 5.19]$ с температурным шагом 0.01.

В рамках поставленной задачи, при помощи нейронной сети, была найдена температура фазового перехода второго рода к которой стремится модель с увеличением линейных размеров $T_c = 4.51 \pm 0.01$. Погрешность определения температуры фазового перехода при помощи свёрточной нейронной сети составляет температурный шаг, с которым моделировалась исходная система. После чего, производилась разметка входных данных по двум классам, до T_c и после T_c , которые символизируют вероятность нахождения системы при

выбранной температуре в состоянии до фазового перехода второго рода, и после фазового перехода.

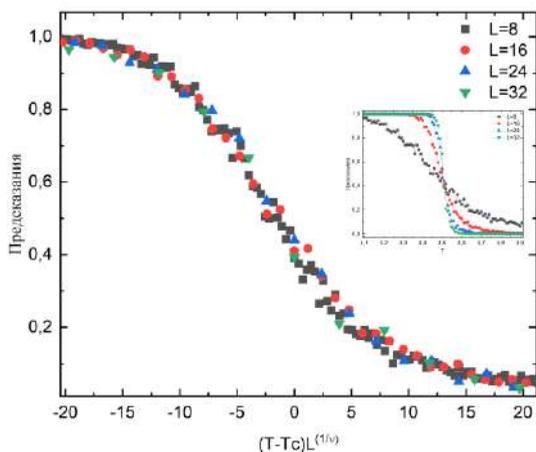


Рисунок 1. На графике демонстрируется скейлинговое соотношение трёхмерной модели Изинга полученное в результате работы нейронной сети, где $\nu = 0.58$, а температура фазового перехода $T_c = 4.51 \pm 0.01$.

Результат работы нейронной сети на рис. 1 демонстрирует применимость нейронной сети к исследованию критического поведения трёхмерной модели Изинга бесконечных линейных размеров.

В результате выполненной работы была найдена температура фазового перехода трёхмерной модели Изинга различных линейных размеров. Было выявлено, что с увеличением линейных размеров трёхмерной модели Изинга происходит смещение температуры фазового перехода второго рода из низкотемпературной фазы, в высокотемпературную.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Leijnen S., van Veen F.* The Neural Network Zoo // Proceedings. 2020. V. 47. P. 9. // <https://doi.org/10.3390/proceedings2020047009>

- [2] *Князь В.В., Выголов О.В., Федоренко В.В., Севрюков В. Д.*
Глубокие сверточные автоэнкодеры: стереоотождествление для
восстановления трехмерных моделей слабо текстурированных
объектов // Машинное обучение и анализ данных, 2017. Р.119 //
10.21469/22233792.3.2.03
- [3] *Azizi A., Pleimling M.* A cautionary tale for machine learning
generated configurations in presence of a conserved quantity//Sci.
Rep. 2021 V. 11. P. 6395.// [10.1038/s41598-021-85683-8](https://doi.org/10.1038/s41598-021-85683-8)

Голота Александр Евгеньевич, e-mail: golota924@gmail.com
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Физический факультет, 1-й курс магистратуры.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Моделирование поведения и расчет магнитных характеристик спин-вентильных наноструктур

Е. В. Дроворуб

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В. В. Прудников

Аннотация: Осуществлено моделирование методами Монте-Карло температурных характеристик и эффектов гистерезиса для спин-вентильных наноструктур. Изучены факторы, влияющие на проявление эффектов гистерезиса.

Ключевые слова: Метод Монте-Карло, анизотропная модель Гейзенберга, эффекты гистерезиса, равновесная намагниченность.

Спин-вентильные структуры, составными элементами которых выступают ультратонкие пленки, находят широкое применение в спинтронике и вычислительной технике. Одним из ключевых свойств спиновых вентилях является осуществление эффекта гигантского магнитосопротивления при малых полях (5 - 50 Э) [1]. Это свойство спиновых вентилях делает их применение наиболее выгодным.

На рис. 1 изображен простейший спиновый вентиль, используемый в приборах спинтроники. Он состоит из двух ферромагнитных пленок, одна из которых представляет собой сплав пермаллоя $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$, а другая пленка из кобальта Co . Ферромагнитные слои разделены немагнитной прослойкой меди Cu , толщина которой подбирается так, чтобы в отсутствие внешнего магнитного поля реализовывалась ферромагнитная связь между слоями. Один из ферромагнитных слоев спаривают со слоем из антиферромагнитного сплава IrMn , взаимодействие с которым закрепляет направление намагниченности пленки во внешнем магнитном поле. В сформированной сэндвич-структуре $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}/\text{Cu}/\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}/\text{IrMn}$ изолированный медью слой $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$ может легко менять ориентацию намагниченности при малых внешних полях, тем самым меняя магнитосопротивление всей структуры в целом. В то же время, намагниченность слоя $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$, связанного с антиферромагнетиком, не меняет своего направления.

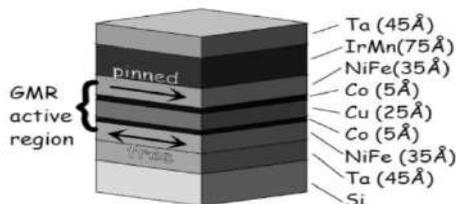


Рисунок 1. Изображение спин-вентильной наноструктуры [2].

Для описания свойств тонких магнитных пленок использовалась модель Гейзенберга с анизотропией типа «легкая плоскость», задаваемая гамильтонианом [3]:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \{ S_i^x S_j^x + 0.8 S_i^y S_j^y + (1 - \Delta(N)) S_i^z S_j^z \} - h \sum_i S_i^x. \quad (1)$$

В (1) S_i^x , S_i^y , S_i^z - компоненты единичных векторов спина, закрепленных в узлах ГЦК-решетки, $\Delta(N)$ – параметр анизотропии типа «легкая плоскость», J_{ij} – обменный интеграл, параметр $h = g\mu_B H$ описывает влияние внешнего магнитного поля, ориентированного в плоскости (xy) пленок.

На начальном этапе рассчитывались температурные зависимости намагниченности для пленок структуры в отсутствие магнитного поля. Результаты расчета (рис. 2, слева) показывают, что свободная пленка с намагниченностью M_1 обладает самой низкой температурой магнитного упорядочения $T_c \approx 2.75 \text{ J/k}_b$. Намагниченность закрепленной пленки M_2 характеризуется $T_c \approx 5.5 \text{ J/k}_b$ за счет сильной обменной связи с антиферромагнетиком. Анализируя поведение монослоев закрепленной пленки (рис. 2, справа), можно заключить, что намагниченность ближайшего монослоя к антиферромагнетику почти совпадает по значению с «шахматной» намагниченностью пленки антиферромагнетика. Намагниченность остальных монослоев заметно ниже, на них слабее сказывается воздействие поля обменного смещения h_{exc} со стороны антиферромагнетика. Ближайший к свободной пленке монослой обладает самой низкой температурой магнитного упорядочения ($T_c \approx 4 \text{ J/k}_b$), в силу слабой обменной связи пленок.

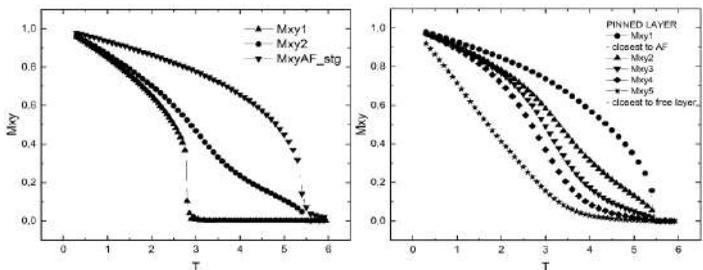


Рисунок 2. Температурные зависимости намагниченности ферромагнитных пленок M_1 и M_2 с толщинами $N_1=N_2=5$ МС (монослоев) и «шахматной» намагниченности M_{AF_stg} пленки антиферромагнетика с толщиной $N_{AF}=15$ МС (слева) и отдельных МС в закрепленной пленке (справа).

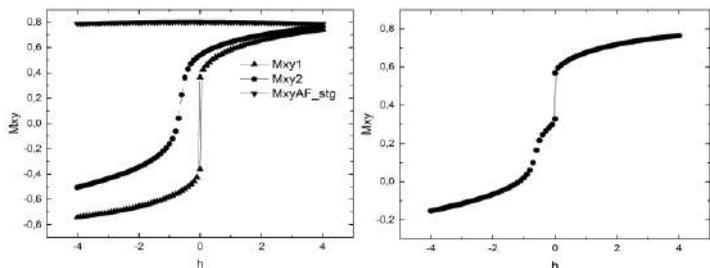


Рисунок 3. Петли гистерезиса ферромагнитных пленок (слева) и петля гистерезиса всей системы (справа). Температура $T = 2.75$.

Затем был проведен расчет эффектов гистерезиса как для всей структуры, так и отдельных пленок и монослоев. Температура выбиралась вблизи критической для свободной пленки ($T_c = 2.75 J_1/k_b$). На рис. 3 представлены петли гистерезиса отдельно для пленок (слева) и для всей структуры в целом (справа). Наблюдается сдвиг петли гистерезиса закрепленной пленки относительно $h=0$ за счет обменного воздействия пленки антиферромагнетика. При этом, петля гистерезиса свободной пленки находится в области малых полей ($h \approx 0$), что существенно облегчает переориентацию намагниченности в пленке, тем самым меняя сопротивление всей структуры. «Шахматная» намагниченность пленки антиферромагнетика всегда остается в области насыщения даже при полях $h \approx 4$.

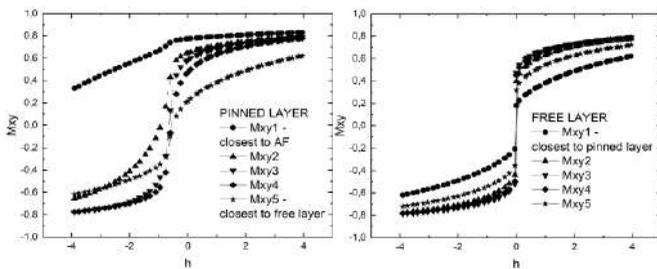


Рисунок 4. Петли гистерезиса каждого монослоя в закрепленной пленке (слева) и свободной пленке (справа). Температура системы $T = 2.75$.

На рис. 4 представлены результаты моделирования гистерезиса намагниченности отдельных монослоев для закрепленной пленки (слева) и свободной пленки (справа). Видно, что намагниченность ближайшего слоя к антиферромагнетику не меняет своей ориентации даже при полях $h = -4$. Основной вклад в появление петли гистерезиса для закрепленной пленки возникает за счет внутренних монослоев пленки. Ближайший монослой к свободной пленке обладает меньшими значениями намагниченности из-за слабой обменной связи ферромагнитных пленок. Показано, что основной вклад в образование петли гистерезиса для свободной пленки возникает за счет внутренних монослоев. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными работами для аналогичных структур [4].

Исследования поддержаны РФФ, проект 23-22-00093.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Dienu B. et al.* Phys. Rev. 1991. V. B43. P. 1297 - 1300.
- [2] *Marrows C.H. et al.* J.Appl.Phys. 2000. V.87. No. 9. Art. No. 5058.
- [3] *Дроворуб Е.В., Прудников В.В., Прудников П.В.* Известия РАН. Серия физическая. 2022. Т. 86. № 2. С. 158-164.
- [4] *Dienu B.* JMMM. 1994. Vol. 136. P. 335-359.

Дроворуб Егор Витальевич, ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, 2 курс магистратуры, физический факультет, 644077, Омск, пр. Мира 55-А, drovorub.egor@gmail.com

Исследование магнитных свойств кирального гелимагнетика CrNb_3S_6

А. В. Минькова

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор П. В. Прудников

Аннотация. Проведено исследование магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 . Было получено хорошее согласование с экспериментальными результатами при моделировании намагниченности. Эффекты гистерезиса показали сильные флуктуации в критической области.

Ключевые слова: одноосный киральный гелимагнетик, взаимодействие Дзялошинского-Мории, методы Монте-Карло.

Биологически значимые молекулы могут существовать как один из двух зеркальных изомеров. Это пример нарушения киральной симметрии. Образование спирали и существование определенного направления вращения спинов, снятие вырождения по киральности – все это происходит благодаря антисимметричному косвенному взаимодействию Дзялошинского-Мории, которое возникает из-за отсутствия инверсионной симметрии и сильной спин-орбитальной связи [1, 2].

В данной работе проводится численное моделирование методами Монте-Карло магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 , со слоистой структурой и, который является металлическим ферромагнетиком. Антисимметричное обменное взаимодействие Дзялошинского-Мории может существовать из-за отсутствия инверсионной симметрии в центре между двумя соседними атомами Cr [3].

Компьютерное моделирование проводилось при линейном размере системы $L=8 \times 8 \times 32 \text{ ML}$, величина внешнего магнитного поля $h = 0.0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0, 1.5, 2.0$, значение константы Дзялошинского-Мории $D = 1.6$. Значение константы межслоевого обменного взаимодействия $J_{\parallel} = 1.0$, константы внутрислоевого обменного взаимодействия $J_{\perp} = 8.0 J_{\parallel}/J_{\parallel}$.

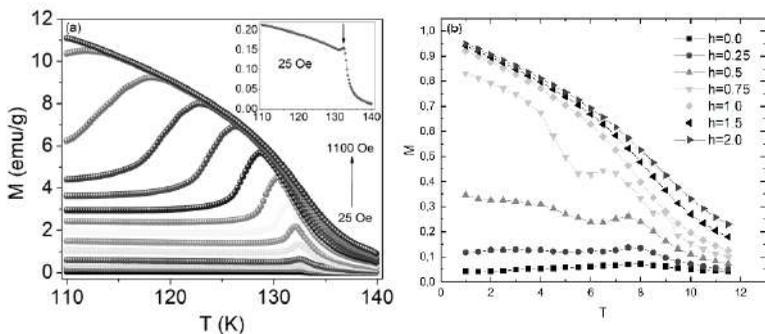


Рисунок 1. Сопоставление экспериментальных результатов исследования [4] и результатов компьютерного моделирования намагниченности одноосного кирального гелимагнетика.

На рис. 1 показано сопоставление экспериментальных и численных исследований температурной зависимости намагниченности. При исследовании одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 было выявлено, что в начале кирального упорядочения возникает резкий излом, который расширяется и смещается в сторону низких температур с увеличением приложенного магнитного поля. Перегиб – начало флуктуационно-неупорядоченной области, которая предшествует киральному магнитному упорядочению в точке излома.

Рис. 2 демонстрирует сравнение экспериментального и численного исследования полевой зависимости намагниченности, которое показало появление трех явных областей: линейную область слабого поля, резкое нелинейное увеличение намагниченности при промежуточном поле и область насыщения.

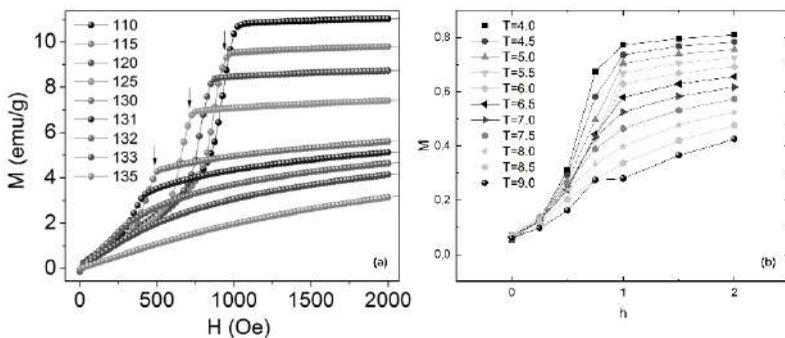


Рисунок 2. Сопоставление экспериментальных результатов исследования [4] и результатов компьютерного моделирования намагниченности одноосного кирального гелимагнетика.

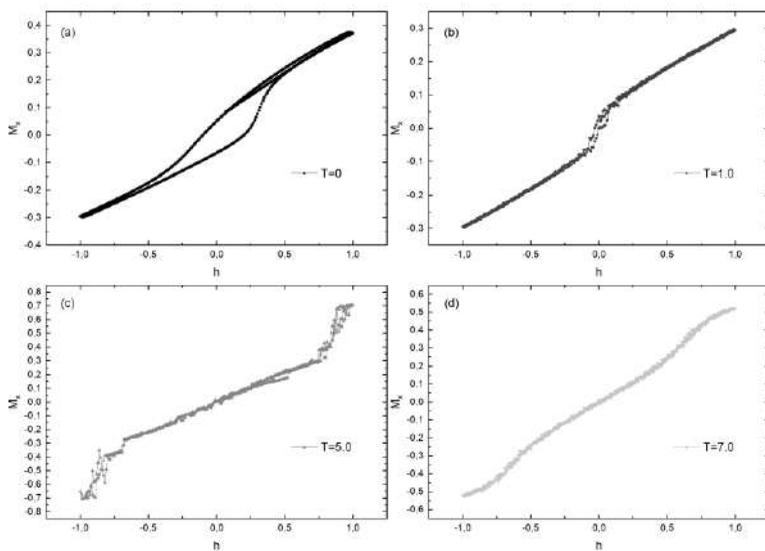


Рисунок 3. Моделирование петель гистерезиса для одноосного кирального гелимагнетика при температурах $T = 0, 1.0, 5.0, 7.0$.

На рис. 3 представлено компьютерное моделирование петель гистерезиса для кирального одноосного гелимагнетика.

Видно, что при температуре $T=0$ (а) появляется явная петля, а при $T=1.0$ (б) она заметно сужается. При температурах, близких к критическим, можно заметить сильные флуктуации, указывающие на критическое поведение системы.

Было проведено компьютерное моделирование магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 . Численное моделирование было проведено методами Монте-Карло с применением алгоритма Метрополиса. Получено хорошее согласование численных результатов с экспериментальными. Гистерезисные эффекты демонстрируют флуктуации вблизи критического поведения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Григорьев С. В. Спиновая киральность и рассеяние поляризованных нейтронов // Диссертация на соискание учёной степени доктора физико-математических наук. 2010.
- [2] Togawa Y., Kousaka Y., Inoue K., Kishine J.I. Symmetry, Structure, and Dynamics of Monoaxial Chiral Magnets // J. Phys. Soc. Jpn. 2016 V. 85. P. 1394-1401. 112001.
- [3] Miyadai T., Kikuchi K., Kondo H., Sakka Sh., Arai M., Ishikawa Y. Magnetic properties of $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$ // Journal of the Physical Society of Japan. 1983. V. 52. P. 1394-1401.
- [4] Clements E.M., Das R., Li L .et al. Critical Behavior and Macroscopic Phase Diagram of the Monoaxial Chiral Helimagnet CrNb_3S_6 // Sci Rep. 2017. V. 7. 6545.

Минькова Александра Вячеславовна, minkovaav@stud.omsu.ru
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Физический факультет, 2-й курс магистратуры.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Исследование ферромагнитной структуры Pd_{1-x}Co_x при малой концентрации кобальта

С. С. Михеев

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М. В. Мамонова

Аннотация. В рамках первопринципных расчетов с использованием программного комплекса VASP были проведены исследования системы Pd/Co. Рассчитаны значения общей намагниченность Co в зависимости от содержания примеси, средняя намагниченность Co и максимальный магнитный момент на атом Pd.

Ключевые слова: DFT, VASP, сплав Pd/Co, примесный ферромагнетизм

Интерес к сплавам Pd/Co и Pd/Fe вызван их потенциальным применением в качестве слабого ферромагнетика в сверхпроводящей магнитной памяти с произвольным доступом (MRAM) на основе джозефсоновского перехода [1]. Несмотря на длительную историю изучения подобных структур, область низкопримесных концентраций изучена недостаточно. Это подтверждается работами, в которых были обнаружены новые особенности фазовой диаграммы сплава PdFe в области низких концентраций [2]. Теоретические расчёты могут помочь сравнить последние результаты с более ранними работами и пролить свет на механизм формирования намагниченности в сплавах PdCo.

Целью данной научно-исследовательской работы было проведение теоретических расчётов, основанных на методе функционала плотности, реализованном в коде VASP для исследования примесного ферромагнетизм для структуры Pd-Co, а также сравнению результатов полученных в ходе теоретических расчётов с данными, полученными другими авторами в статье.

В данной работе исследуется система, состоящая из палладия и замещёнными ферромагнитными атомами кобальта. Во время расчётов рассматривались структуры с различной концентрацией Co в Pd. Расчёты были основаны на теории функционала плотности, реализованной в коде VASP. Обменные и корреляционные эффекты учитывались с помощью

обобщённой градиентной аппроксимации (GGA-PBE). Для дискретизации зон Бриллюэна использовались сетки Монкхорста-Пака, включающие включающие $3 \times 3 \times 3$ k-точек. Структуры моделировались как ячейки, состоящие из заполненной матрицы FCC, образованной атомами палладия, с ионами кобальта, замещающими только октаэдрически координированные участки (замещение проходило по одному атому).

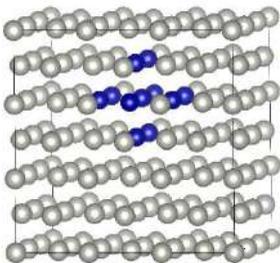
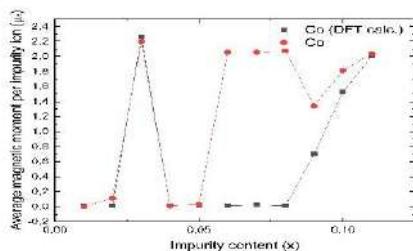
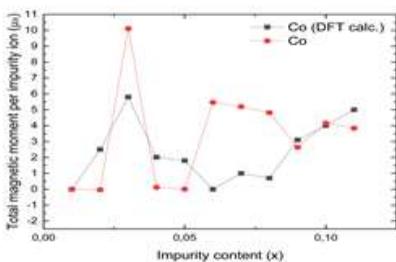


Рисунок 1. Суперъчейка Pd, использованная в расчётах. Синие сферы соответствуют атомам кобальта, серые палладий.

На графиках ниже представлены результаты расчетов следующих величин: общая намагниченность, средняя намагниченность, а также максимальный магнитный момент на атом палладия в зависимости от содержания примеси полученных в ходе работы (красный) и взятых из работы других авторов посвящённой этой же тематике (черный)[3].

Расчитанная общая намагниченность в зависимости от содержания примеси показана на рисунке 2. При низких концентрациях примеси наблюдается пренебрежимо малая намагниченность ячейки. При таких концентрациях C_0 оказался немагнитным. Средняя намагниченность показана на рисунке 3, результаты согласуются с рисунком 2. В области низких концентраций немагнитные примеси не влияют на намагниченность окружающего Pd, что видно на рисунке 4.



A)

B)

Рисунок 2. А) Общая намагниченность системы Pd1-xCox ($x = 0.01 - 0.1$), рассчитанная на атом примеси, в зависимости от содержания примеси в суперъчейке $3 \times 3 \times 3$ Pd.

В) Средняя намагниченность Co в системе Pd1-xCox ($x = 0.01 - 0.1$) в зависимости от содержания примеси в суперъчейке $3 \times 3 \times 3$ Pd.

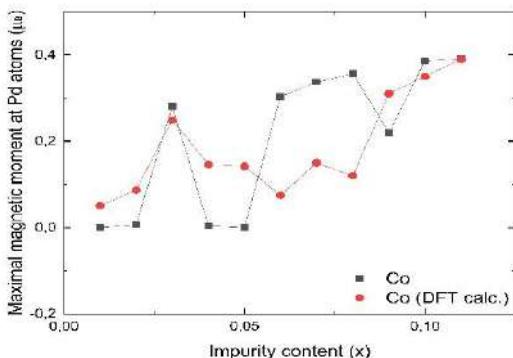


Рисунок 4. Максимальный магнитный момент на атом Pd в системе Pd-xCox ($x = 0.01 - 0.1$) в зависимости от содержания примеси в суперъчейке $3 \times 3 \times 3$ Pd.

Поведение низкоконцентрированной области, в частности нулевые магнитные моменты примеси, согласуются с теорией примесного ферромагнетизма [4]. Кривые Co для общей намагниченности, а также магнитные моменты Co и генерируемые магнитные моменты на атомах Pd, имеют

локальный максимум. Эта особенность при $x = 0.03$ для Co была проверена несколькими расчётами с разными условиями заданными в INCAR. Предполагается, что намагниченность зависит от расстояния от примеси до примеси. При определенном расположении примеси максимальное количество поляризованных атомов палладия участвует в дальнейшем магнитном порядке, что приводит к заметному изменению магнитных свойств, а именно увеличению намагниченности.

Было выявлено, что при низких концентрациях примеси наблюдается пренебрежимо малая намагниченность ячейки. При таких концентрациях Co оказался немагнитным. В области низких концентраций немагнитные примеси не влияют на намагниченность окружающего Pd. Имеется локальный максимум для общей намагниченности системы, средней намагниченности Co и максимального магнитного момента, приходящегося на атом Pd при определённой концентрации Co ($x = 0.03$).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Ryazanov, V.V.; Bol'ginov, V.V.; Sobanin, D.S.; Vernik, I.V.; Tolpygo, S.K.; Kadin, A.M.; Mukhanov, O.A.* Magnetic Josephson junction technology for digital and memory applications // *Phys. Procedia* 2012, 36, 35–41.
- [2] *Gumarov, A.I.; Yanilkin, I.V.; Yusupov, R.V.; Kiiamov, A.G.; Tagirov, L.R.; Khaibullin, R.I.* Iron-implanted epitaxial palladium thin films: Structure, ferromagnetism and signatures of spinodal decomposition // *Mater. Lett.* 2021, 305, 130783.
- [3] *Korableva, A.; Piyanzina, I.; Gumarov, A.; Yanilkin, I.; Khaibullin, R.* Impurity Ferromagnetism of Pd-Fe and Pd-Co Alloys: Ab Initio vs. Experiment // *Mater. Proc.* 2022, 9, 22.
- [4] *Korenblit, I.Y.; Shender, E.F.* Ferromagnetism of disordered systems // *Sov. Phys. Uspekhi.* 1978, 21, 832–851.

Михеев Сергей Сергеевич, sergeymiheev12072000@gmail.com
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Физический факультет, 1-й курс магистратуры.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Численные методы адсорбции фурфурола на палладии в водной среде

Д. И. Поликовская

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М.В. Мамонова

Аннотация. В работе будет проводиться численные вычисления адсорбции фурфурола на палладии в водной среде с вертикальным и горизонтальным расположением молекулы воды.

Ключевые слова: фурфурол, адсорбция фурфурола, молекула воды, палладий, VASP.

В последнее время встал вопрос по поиску материала способного заменить естественные топливные ресурсов такие как нефть и газ. Это связано с тем что количество потребления с каждым годом увеличивается и приводит к уменьшению их запасов. В процессе исследования перед учёными стояли несколько важных аспектов. Во первых нужен такой материал себестоимость которого будет относительно дешёвая. И второй пункт материал должен быть экологически безопасным для окружающей среды.

В процессе исследования таким материалом стал фурфурол. Фурфурол является продуктом переработки сельскохозяйственных отходов. При помощи реакции гидрирования возможно произвести синтез фурфурола до биотоплива. Для увеличения реакции гидрирования используют металлический катализатор, зачастую это является Pd. Pd обладает высокой гидрирующей способностью при низких температурах [1].

В статье будем рассматривать вычисление адсорбции фурфурола на палладии в водном растворе. Для вычисления энергии адсорбции используют метод функционала плотности DFT, с использованием программного комплекса VASP.

В процессе работы были сформированы структурные файлы фурфурола на палладии с горизонтальным и вертикальным расположением молекул воды. Далее были

произведены вычисления начальной энергии фурфурола на палладию. Результаты расчётов структурного расположения фурфурола на палладию в водном растворе можно увидеть на рисунке 1 (с и d). Затем были произведены аналогичные расчёты для палладия с молекулами воды только без фурфурола. Полученные результаты структурного файла можно увидеть на рисунке 1 (а и b).

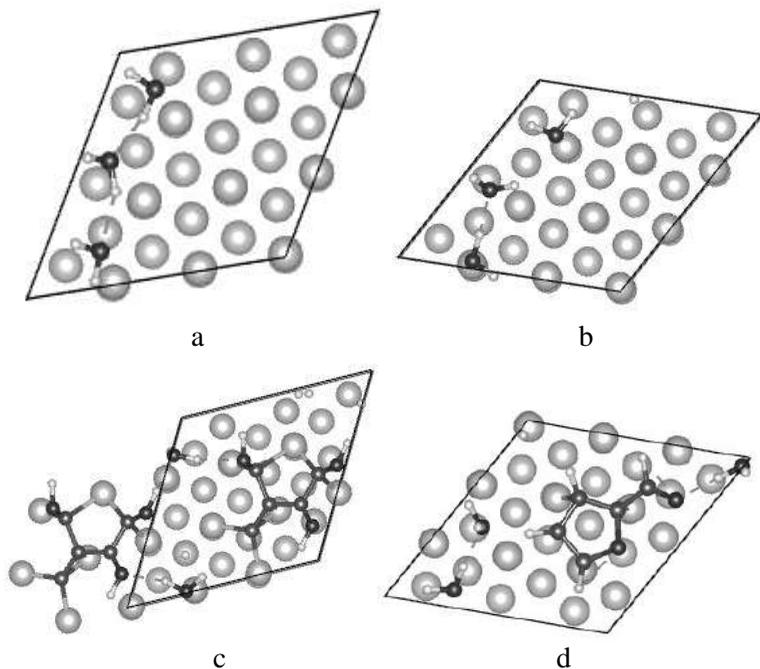


Рисунок 1. Фурфурол на палладию с вертикальной (слева) и горизонтальным (справа) расположением воды

Проведя расчёты и вычислив начальную энергию, затем проведём расчёт энергии адсорбции. Энергия адсорбции вычисляем при помощи формулы [1]:

$$E_{abs} = E_{slab+i} - E_{slab} - E_i \quad (1)$$

E_{slab+i} — полная энергия адсорбат+пластина Pd;

E_{slab} — полная энергия чистой пластины Pd;

E_i – полная энергия адсорбата в газовой фазе.

PBE (3 × 3-unit cell)	$E_{H_2O_{ver}}$, eV	- 294.4465
	$E_{H_2O_{gor}}$, eV	-292.5356
	$E_{Pd+H_2O_{ver}}$, eV	-221,4562
	$E_{Pd+H_2O_{gor}}$, eV	-221,2526
	E_{fur}, eV	-70.7496
E_{ver}^{ads} eV	-2.2407	
E_{gor}^{ads} eV	-0.5338	

Из результатов, приведённых в таблице, можно выделить что энергия адсорбции имеет отрицательное значение. Значит, что адсорбция в реакции гидрирования фурфурола на палладии реализуется. Также можно выделить, что адсорбция фурфурола на палладии с вертикальным расположением молекул воды более энергетически выгодна, чем с горизонтальным расположением молекул воды.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Shengguang Wang Coverage-Induced Conformational Effect on Activity and Selectivity: Hydrogenation and Decarbonylation of Furfural on Pd (111)* / Shengguang Wang, Vassili Vorotnikov, Dionisios G. Vlachos. ACS Catalysis– 2014 – T. 104 – С.112.

Поликовская Дарья Игоревна
 Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
 Физический факультет, 2-й курс магистратуры,
 644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812)647787,
 pdaria2000@yandex.ru

Исследование проявления эффектов магнитной анизотропии в системе Co/Cu/Co в рамках первопринципного подхода метода функционала спиновой плотности

Р. А. Сухачев

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М.В. Мамонова

Аннотация Работа посвящена численному исследованию магнитных свойств системы Co/Cu/Co с учетом различных типов анизотропии с помощью программного комплекса VASP. Исследовалось влияние вкладов магнитокристаллической анизотропии и анизотропии формы на энергию магнитной анизотропии. Получена зависимость значений энергий магнитной анизотропии, спин-орбитального взаимодействия и диполь-дипольного взаимодействия от толщины магнитного слоя кобальта.

Ключевые слова: тонкие пленки, VASP, магнитная анизотропия.

Ультратонкие пленки представляют собой важную категорию современных материалов, которая характеризуется важным влиянием на технологический прогресс. Они находят применение в устройствах спинтроники, нанoeлектроники и вычислительной технике. Например, в качестве магнитной основы для хранения и записи информации в запоминающих устройствах. Это позволяет получить высокую плотность и скорость записи информации [1].

Энергия магнитной анизотропии может быть разделена на два вклада: $E_{MA} = E_{MKA} + \Delta E_{dd}$, один из которых – это энергия магнитокристаллической анизотропии $E_{MKA} = \Delta E_{SOC}$, индуцированная спин-орбитальной связью, а другой – это энергия анизотропии формы ΔE_{dd} , обусловленная магнитными дипольными взаимодействиями [2].

В таблице 1 приведены рассчитанные значения среднего магнитного момента пленки кобальта толщиной от 1 до 8 монослоев при толщине меди от 3 до 9 монослоев.

Таблица 1. Значение среднего магнитного момента для системы Co/Cu при разном направлении намагниченности: \parallel -в плоскости пленки и \perp -перпендикулярно ей.

N_{Co}	$N_{Cu} = 3$		$N_{Cu} = 5$		$N_{Cu} = 7$		$N_{Cu} = 9$	
	$\mu_{tot}, \mu_B/\text{ат}$							
	\parallel	\perp	\parallel	\perp	\parallel	\perp	\parallel	\perp
1	1.879	1.878	1,828	1,828	1,828	1,828	1,833	1,833
2	1.692	1.692	1,687	1,687	1,693	1,694	1,694	1,696
3	1.729	1.729	1,713	1,714	1,712	1,713	1,711	1,711

Можно сделать вывод, что различные спиновые конфигурации слабо влияют на значения магнитных моментов.

В таблице 2 приведены рассчитанные в программном комплексе VASP с использованием методики [3] значения энергий магнитной анизотропии $E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel}$.

Таблица 2. Значения энергий спин-орбитального взаимодействия при разном направлении намагниченности и их разность.

N_{Co}	$E_{soc}(\perp), \text{эВ}$	$E_{soc}(\parallel), \text{эВ}$	$\Delta E_{soc}, \text{мэВ}$	$E_{MA}, \text{мэВ}$
1	-0.076661	-0.078297	1.636	0.898
2	-0.106206	-0.106064	-0.142	-0.062
3	-0.139079	-0.141456	2.377	1.161
4	-0.170703	-0.172107	1.403	1.098
5	-0.202876	-0.204850	1.974	1.032
6	-0.233835	-0.236287	2.452	1.525
7	-0.266121	-0.269110	2.986	1.760
8	-0.297662	-0.300837	3.176	2,040

Ее можно определить, как разность полных энергий системы при направлении магнитных моментов в плоскости пленки E_{\parallel} и перпендикулярно ей E_{\perp} и спин-орбитального взаимодействия при разном направлении магнитных моментов и их разность. Количество монослоев кобальта менялось от 1 до 8, толщина меди была постоянной 3 монослоя.

В таблице 3 приведены рассчитанные значения энергий магнитной анизотропии, спин-орбитального взаимодействия и анизотропии формы в зависимости от количества монослоев подложки из меди и магнитного материала кобальта. Энергию анизотропии формы можно представить в виде разности энергий

диполь-дипольного взаимодействия: $\Delta E_{dd} = E_{dd}(\vec{m}_\perp) - E_{dd}(\vec{m}_\parallel)$, в свою очередь выражение для нахождения энергии диполь-дипольного взаимодействия имеет следующий вид:

$$E_{dd} = \frac{1}{c^2} \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{M}_i \cdot \vec{M}_j}{|\vec{R}_{ij}|^3} - 3 \frac{(\vec{M}_i \cdot \vec{R}_{ij})(\vec{M}_j \cdot \vec{R}_{ij})}{|\vec{R}_{ij}|^5} \right],$$

где $\vec{M}_{i(j)}$ - магнитный момент $i(j)$ узла [4].

Таблица 3. Значения энергий магнитной анизотропии, спин-орбитального взаимодействия и анизотропии формы в зависимости от количества монослоев подложки из меди и магнитного материала кобальта.

N_{Co}	N_{Cu}	E_{MA} , мЭВ	ΔE_{SOC} , мЭВ	ΔE_{dd} , мЭВ
1	3	0,898	1,636	-0,01218
	5	0,944		
	7	0,899	1,560	-0,00195
	9	0,930	1,641	-0,00139
2	3	-0,062	-0,142	-0,095
	5	0,092	0,053	-0,080
	7	0,038	0,073	-0,077
	9	-0,104	0,043	-0,076
3	3	1,161	2,377	-0,442
	5	1,508	2,257	-0,422
	7	1,273	2,353	-0,415
	9	1,152	2,311	-0,412

Для толщины магнитного материала кобальта 2 монослоя была обнаружена слабая магнитная анизотропия.

На рисунке 1 приведена зависимость энергий магнитной анизотропии, спин-орбитального взаимодействия и анизотропии формы при разном количестве монослоев магнитного материала кобальта (от 1 до 8) с постоянным числом монослоев немагнитной подложки из меди равном 3.

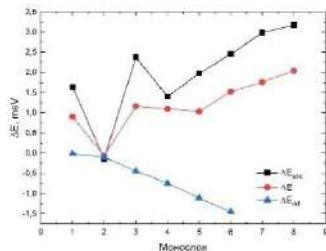


Рисунок 1. Значения энергий магнитной анизотропии, спин-орбитального взаимодействия и анизотропии формы в зависимости от количества монослоев магнитного материала кобальта.

Полученные нами значения разности энергий спин-орбитального взаимодействия существенно больше разности энергий диполь-дипольного взаимодействия, следовательно, можно сделать вывод о том, что основное влияние на энергию магнитной анизотропии оказывает вклад магнитокристаллической анизотропии, обусловленной спин-орбитальным взаимодействием.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Heinrich B., Bland J.A.C.* Ultrathin Magnetic Structures IV. Berlin, Heidelberg:Springer. 2005. P. 258.
- [2] *Bornemann S., Minár J., Braun J., Ködderitzsch D., Ebert H.* Ab-initio description of the magnetic shape anisotropy due to the Breit interaction // Solid State Commun. 2012. V152. P.85.
- [3] *Steiner S., Khmelevskiy S., Marsmann M., Kresse G.* Calculation of the magnetic anisotropy with projected-augmented-wave methodology and the case study of disordered Fe(1 – x) Co(x) alloys // Phys. Rev. B. 2016. V.93. P.224425.
- [4] *Daalderop G. H. O., Kelly P. J., Schuurmans M. F. H.* First-principles calculation of the magnetocrystalline anisotropy energy of iron, cobalt, and nickel // Phys. Rev. B .1990. V41. P.11919.

Сухачев Руслан Артурович, sukhachevruslan@gmail.ru.

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Физический факультет, 2-й курс магистратуры. 644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Моделирование неравновесной критической динамики трехмерной модели Гейзенберга с сильной одноосной анизотропией

В. В. Хитринцева

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В.В. Прудников

Аннотация. Представлены результаты численного Монте-Карло исследования влияния начальных состояний и структурного беспорядка на неравновесное поведение анизотропной модели Гейзенберга и на проявление эффектов памяти.

Ключевые слова: критическое поведение, влияние дефектов.

Большое значение для физики твердого тела имеет трехмерная анизотропная модель Гейзенберга, учитывающая эффекты магнито-кристаллографической анизотропии. В данной работе проведено численное Монте-Карло исследование проявления эффектов памяти и влияния точечных дефектов структуры на неравновесное критическое поведение анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось» и $\Delta = 0.63$. Гамильтониан изучаемой системы имеет вид [1]:

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

где $J > 0$ – константа обменного взаимодействия между спинами, $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор; p_i, p_j – числа заполнения, принимают значения 0 или 1.

Система с медленной динамикой характеризуется эффектами старения [2], нарушением флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) и зависимостью поведения системы от начального состояния.

На рис. 1 отражено проявление эффектов старения в поведении $C_{zz}(t, t_w)$ и $\chi(t, t_w)$, характеризующихся замедлением временного спадания с ростом времени ожидания t_w . При эволюции из низкотемпературного начального состояния (ННС) автокорреляционная функция имеет более сильную зависимость от t_w , чем при эволюции из высокотемпературного начального состояния (ВНС). По графикам видно, что увеличение

концентрации дефектов структуры приводит к замедлению временного спада $C_{zz}(t, t_w)$ и $\chi(t, t_w)$.

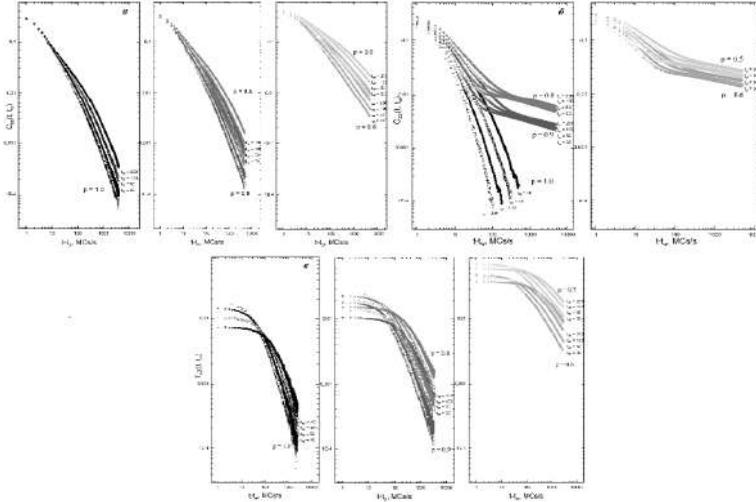


Рисунок 1. Временные зависимости $C_{zz}(t, t_w)$ (а) и $\chi(t, t_w)$ (б) при эволюции системы из ВНС; $C_{zz}(t, t_w)$ (б) при эволюции из ННС.

В режиме старения, т.е. на временах $t - t_w \sim t_w$, автокорреляционная функция и динамическая восприимчивость описываются соотношениями:

$$C(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/\nu z} F_C(t/t_w), \quad \chi(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/\nu z} F_\chi(t/t_w). \quad (2)$$

В целях проверки скейлинговых соотношений (2) были построены зависимости $t_w^{2\beta/\nu z} C_z(t, t_w)$ и $t_w^{2\beta/\nu z} \chi(t, t_w)$ от t/t_w . Определено, что для $C_{zz}(t, t_w)$ и $\chi(t, t_w)$ коллапс данных для различных t_w реализуется лишь для случая $p = 1.0$. Для неупорядоченных систем совпадение кривых возможно только на временах до режима старения.

Введение более сложной скейлинговой зависимости в виде $F_C(t/t_w^\mu)$, $F_\chi(t/t_w^\mu)$ позволяет получить совпадение кривых для $C_{zz}(t, t_w)$ и для $\chi(t, t_w)$ в долговременном режиме. При этом восстановление коллапса данных на временах $t - t_w \gg t_w$ приводит к разрушению коллапса этих же данных на временах до

режима старения. Случай скейлинговой зависимости с $\mu > 1$ классифицируется как явление «сверхстарения».

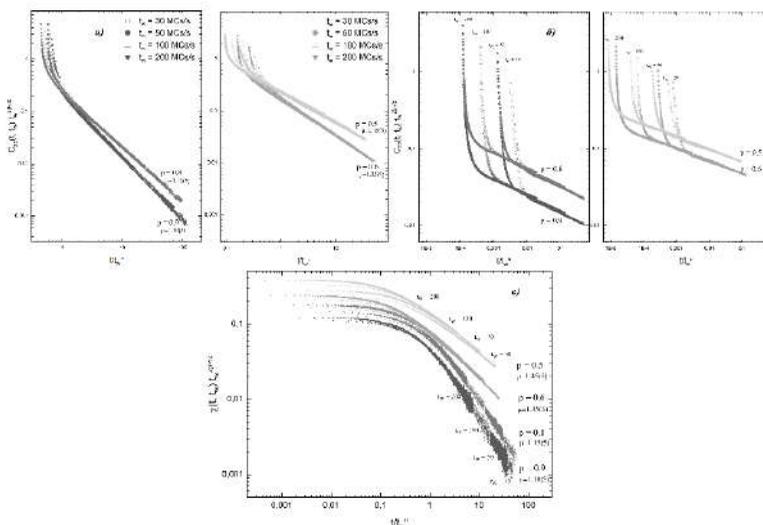


Рисунок 2. Эффект «сверхстарения», наблюдаемый в скейлинговом поведении $t_w^{2\beta/\nu z} C_z(t, t_w)$ (а) и $t_w^{2\beta/\nu z} \chi(t, t_w)$ (в) в зависимости от t/t_w^μ при эволюции системы из *BHC*; $t_w^{2\beta/\nu z} C_z(t, t_w)$ (б) при эволюции из *HNC*.

В ходе работы осуществлялось изучение эффектов памяти в поведении автокорреляционной функции $C_{zz}(t, t_w)$ при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния. Эффекты памяти проявляются при «замораживании» системы на $\Delta T = T_c - T > 0$ на этапе старения в момент времени наблюдения $t_1 - t_w \sim t_w$ на период $\Delta t = t_2 - t_1$ и последующем возвращении температуры системы к критической.

Из рис. 3 видно, что с момента «замораживания» системы значение автокорреляционной функции возрастает до момента возвращения к критической температуре. После возвращения системы к T_c автокорреляционная функция стремится вернуться к значению, которое она имела до «замораживания». Анализ полученных данных показывает, что период «заморозки» не сказывается на памяти. Так же с увеличением концентрации дефектов структуры система быстрее возвращается в состояние,

которое имела в момент «замораживания». Зависимость времени восстановления памяти от количества структурных дефектов характерна как для периода «заморозки» $t_2 - t_1 = t_w$, так и для $t_2 - t_1 = 4t_w$. Кроме того, в случае неупорядоченных систем по мере роста t_w сокращается время, затрачиваемое на восстановление памяти.

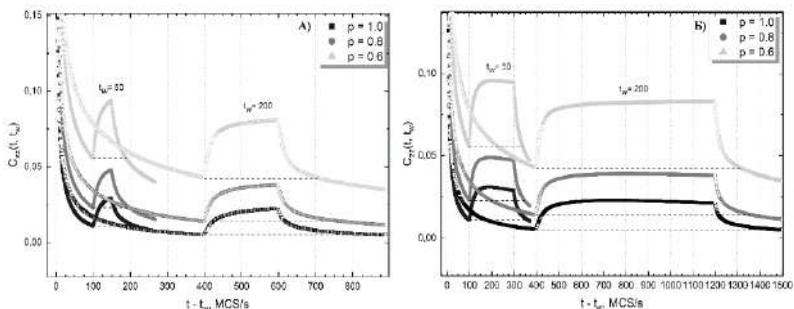


Рисунок 3. Эффекты памяти в неравновесном критическом поведении автокорреляционной функции $C_{zz}(t, t_w)$ для систем с $p = 1.0, 0.8, 0.5$ при их «замораживании» на величину $\Delta T = 0.5$ в момент времени $t_1 - t_w = 2t_w$, временной интервал «замораживания»: (а) $\Delta t = t_w$; (б) $\Delta t = 4t_w$.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 23-22-00093.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Binder K., Landau D.P. Critical properties of the two-dimensional anisotropic Heisenberg model // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 1140.
- [2] Calabrese P., Gambassi A. Aging and fluctuation-dissipation ratio for the dilute Ising model // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 212-407.

Хитринцева Валерия Вадимовна,
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
 1 курс магистратуры, Физический факультет,
 644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
 valeri_valeria@mail.ru

Предсказание критического поведения низкоразмерных неупорядоченных систем сверточной нейросетью

Е. И. Хорошев

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор П. В. Прудников

Аннотация. Представлены результаты исследования сверточной нейросетью критического поведения двумерной XY-модели с точечными дефектами структуры. Была рассмотрена сверточная нейронная сеть, реализованная с помощью стандартной библиотеки TensorFlow для классификации неупорядоченных фаз. Получены предсказания фазового перехода II рода для низкоразмерных неупорядоченных систем. При исследовании корреляционных конфигураций были испробованы несколько методов их преобразования в растровое изображение. Также была построена скейлинговая зависимость.

Ключевые слова: Сверточная нейросеть, критическое поведение, двумерная неупорядоченная XY-модель, топологический фазовый переход БКТ, влияние дефектов структуры, скейлинговое соотношение.

Использовать машинное обучение в качестве моделирования спиновых систем начали лишь в последнее время, однако этот метод набирает популярность у исследователей [1-3]. Машинное обучение отличается своей производительностью и простотой в использовании, поэтому его применение стало широко в области статистической физики.

Актуальность исследования двумерной XY-модели обусловлена её применимостью для описания свойств широкого ряда физических систем. Научный интерес к двумерной XY-модели связан не только с ее прикладными свойствами, но и особенностями низкотемпературной топологической фазы и особенностями топологического фазового перехода. Задача детектирования температуры фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулеса [4, 5] T_{BKT} в различных системах является актуальной задачей [6].

Целью данной работы является определение методами машинного обучения значения температуры фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулеса T_{BKT} для структурно

неупорядоченной двумерной XY-модели спиновой концентрации $p = 0.8$ и $p = 0.9$.

Нейронные сети для глубокого обучения представляют собой взвешенный направленный граф, узлы которого (нейроны в нашем случае) расположены слой за слоем. Каждый нейрон предыдущего слоя связан с нейронами последующего. Эти связи между ними имеют определенные веса, которые являются основной частью нейронных сетей: от весов связей зависит предсказание нейронной сети. Каждый нейрон имеет активационную функцию, которая отвечает за вес связи на его выходе. Таким образом, каждый слой архитектуры анализирует значения нейронов входного слоя, а активационные функции преобразуют значения весов между нейронами.

Гамильтониан модели может быть описан в следующем виде:

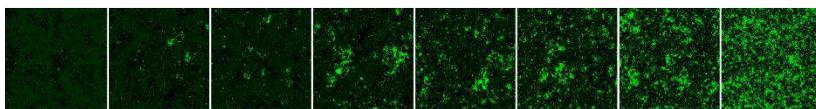
$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle}^N p_i p_j \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (1)$$

где \vec{S}_i – спин, который находится в i -ом узле решетки, единичный двумерный $\vec{S}_i = (S_{ix}, S_{iy})$ (i, j) вектор показывает, что суммирование идет по ближайшим соседям. Дефекты замороженные (в процессе их расположение не менялось) распределялись по решетке равномерно и некоррелированно (с концентрацией $c_{\text{imp}} = 1 - p$, где p – спиновая концентрация)

Наиболее точные результаты анализа сегодня демонстрируют нейронные сети на основе сверточной архитектуры. Когда нейроны связаны только с несколькими нейронами следующего слоя, слой называется сверточным. Сверточный слой действует как фильтр, который отсеивает наименее информативные части входных данных. Для построения сверточной нейронной сети используется TensorFlow — платформа с открытым исходным кодом для машинного обучения [4]. На схеме изображена сверточная нейронная сеть, использованная при моделировании XY-модели.

В качестве входного слоя использовались корреляционные матрицы, полученные путём обработки спинов по формуле:

$$g_i(L/2) = \frac{1}{2} \left[S_{x,y} S_{x+\frac{L}{2},y} + S_{x,y} S_{x,y+\frac{L}{2}} \right]$$



$T = 0.3$ $T = 0.4$ $T = 0.5$ $T = 0.6$ $T = 0.7$ $T = 0.8$ $T = 0.9$ $T = 1.0$

Рисунок. 1. Корреляционные матрицы XY-модели для $0.3 \leq T \leq 1.0$.

Для входного слоя используются корреляционные конфигурации $g_i(L/2)$, полученные методами Монте-Карло. Для каждого линейного размера было просчитано 100 конфигураций с усреднением по 10000 шагов Монте-Карло. После этого корреляционные матрицы были преобразованы в изображения для дальнейшей работы сверточной нейронной сети.

Был проведён расчёт критической температуры фазового перехода для двумерной XY-модели концентрации $p = 0.9$ и $p = 0.8$ линейных размеров $L = 16, 32, 64$ при температурах в пределах $0.3 \leq T \leq 1.6$ с температурным шагом 0.02. Пересечения графиков определяют фазовый переход в температуре рядом со значением $T_{\text{вкт}}$.

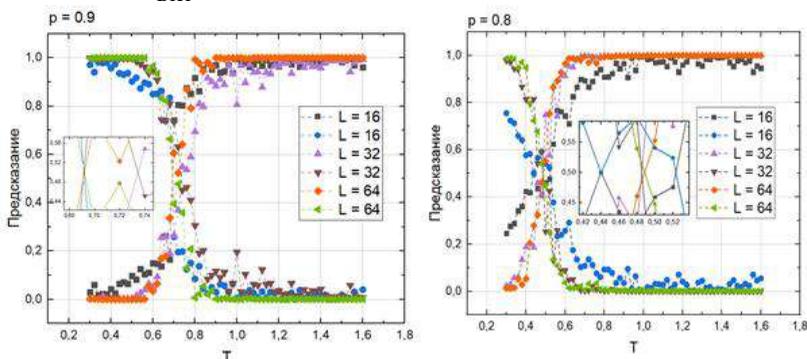


Рисунок. 2. Графики вероятностей предсказания фаз двумерной XY-модели линейных размеров $L = 16, 32, 64$, спиновая концентрация $p = 0.9$ (слева) и $p = 0.8$ (справа).

Было определено значение температуры фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулеса $T_{\text{вкт}}(p)$ для двумерной XY-модели методами машинного обучения. Было показано, что сверточная нейронная сеть способна “отличать”

низкотемпературные фазы от высокотемпературных. Таким образом, методы машинного обучения начинают дополнять традиционно применяемые в научных исследованиях методы статистического анализа.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Maskara N., Buchhold M., Endres M., van Nieuwenburg E.* Learning algorithm reflecting universal scaling behavior near phase transitions // *Phys. Rev. Res.* 2022. V. 4.
- [2] *Albarrací F., Rosales H.* Machine learning techniques to construct detailed phase diagrams for skyrmion systems // *Phys. Rev. B.* 2022. V. 105. P. 214423.
- [3] *Wang W., Wang Z., Zhang Y., Sun B., Xia K.* Learning Order Parameters from Videos of Skyrmion Dynamical Phases with Neural Networks. // *Phys. Rev. Applied.* 2021. V. 16. P. 014005.
- [4] *Березинский В.Л.* Разрушение дальнего порядка в одномерных и двумерных системах с непрерывной группой симметрии. I. Классические системы // *ЖЭТФ.* 1970. V. 59. P. 907.
- [5] *Kosterlitz J.M., Thouless D.J.* Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J. Phys. C.* 1973. V. 6. P. 1181.
- [6] *Contessi D., Ricci E., Recati A., Rizzi M.* Detection of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition via Generative Adversarial Networks // *SciPost Phys.* 2022. V. 12. P. 107.

Хорошев Егор Игоревич, egor@khoroshev.net

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Физический факультет, 1-й курс магистратуры.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Исследование туннельного магнитосопротивления методами Монте-Карло

Е. К. Черноок

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор В. В. Прудников

Аннотация. Было проведено моделирование наноструктуры с туннельным магнитосопротивлением с использованием алгоритма Метрополиса. Исследованы свойства системы, состоящей из двух ультратонких ферромагнитных плёнок кобальта Co, разделённых диэлектриком. Рассчитаны такие величины, как коэффициент магнитосопротивления, спиновая поляризация, намагничённость.

Ключевые слова: туннельное магнитосопротивление, методы Монте-Карло, модель Гейзенберга, намагничённость в плоскости плёнок, спиновая поляризация.

Явления гигантского и туннельного магнитосопротивления широко используется в современной технике [1]. На основе этих эффектов создаются датчики магнитного поля, считывающие головки жёстких дисков и ячейки MRAM памяти.

Наноструктуры, в которых проявляется эффект туннельного магнитосопротивления, обычно состоят из двух слоёв ферромагнитных материалов, разделённых слоем диэлектрика с толщиной около 1 нм [1]. Диэлектрик выступает в роли потенциального барьера для электронов – носителей тока.

В данной работе проводилось численное моделирование наноструктур с туннельным магнитосопротивлением методами Монте-Карло. В качестве ферромагнетика была выбрана плёнка ГЦК кобальта с линейными размерами: в плоскости $L = 64$, толщина $N = 7$ монослоёв. В плоскости плёнок накладывались периодические граничные условия, перпендикулярно плоскости плёнок — свободные. Величины, имеющие размерность энергии, нормировались на обменный интеграл взаимодействия атомов кобальта $J_1 = 4 \times 10^{-14}$ эрг. Прослойка диэлектрика моделировалась отсутствием обменного взаимодействия между слоями ферромагнетика — $J_2 = 0$. Такую трёхслойную наноструктуру с ферромагнитными слоями кобальта можно

моделировать гамильтонианом Гейзенберга с анизотропией типа лёгкая плоскость:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \{ S_i^x S_j^x + 0.8 \cdot S_i^y S_j^y + (1 - \Delta(N)) S_i^z S_j^z \} - h_x \sum_i S_i^x, \quad (1)$$

где сумма берётся по соседним атомам (количество соседей в ГЦК решётке $z = 8$). $\mathbf{S}_i = (S^x, S^y, S^z)$ — единичный спин i -го атома в модели Гейзенберга. J_{ij} — обменный интеграл взаимодействия соседних атомов. Если атомы принадлежат одной плёнке, то интеграл J_{ij} принимается равным $J_1 = 1$, если принадлежат разным, то значение $J_{ij} = J_2 = 0$. Δ — параметр анизотропии типа лёгкая плоскость, зависящий от толщины N плёнки ферромагнетика. Коэффициент 0.8 в гамильтониане (1) при у-составляющих спина был введен для снятия вырождения в плоскости пленки Оху.

Моделирование транспортных свойств магнитных структур с током перпендикулярным плоскости пленок (ТПП) с использованием разработанной в [2] Монте-Карло методики позволяет рассчитать температурную зависимость равновесного магнитосопротивления, вводимого соотношением:

$$\delta = \frac{R_{AP} - R_p}{R_p}, \quad (2)$$

где R_{AP} - сопротивление образца при антипараллельной ориентации намагниченностей ближайших ферромагнитных слоев, а R_p - при параллельной ориентации намагниченностей слоев. Сопротивления рассчитываются через плотность тока, получаемую в ходе моделирования [2]. Наряду с этим, коэффициент туннельного магнитосопротивления δ может быть выражен через спиновые поляризации пленок [3]:

$$\delta = \frac{2P_1 P_2}{1 - P_1 P_2}, \quad (3)$$

где P_1 и P_2 — спиновые поляризации первой и второй плёнок, соответственно. Эти поляризации вычисляются при помощи электронной плотности, получаемой в ходе моделирования.

В ходе вычислений, проведенных при температуре $T_s = 300$ К, рассчитывались такие величины как намагниченность каждой плёнки, токовые и электронные плотности для электронов с

проекциями спинов $+1/2$ и $-1/2$, величина магнитосопротивления. В ходе расчётов были получены следующие результаты:

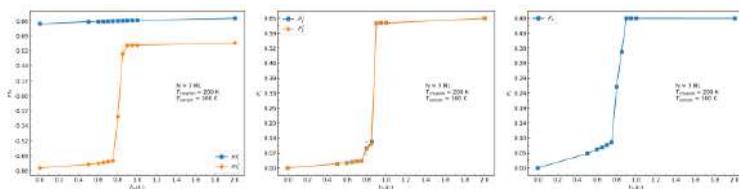


Рисунок 1. Зависимость x-составляющей намагниченности плёнок (слева), спиновой поляризации плёнок (центр), вычисленной через электронные плотности, и спиновой поляризации, вычисленной из формулы (3) для магнитосопротивления (справа) от величины магнитного поля h .

Из графиков для намагниченности пленок (рис 1) видно, что переворот их намагниченностей во внешнем магнитном поле h из антипараллельной в параллельную конфигурацию происходит при значении $h = 0.8$ в единицах обменного интеграла J_1 . Спиновая поляризация пленок значительно повышается при переходе от антипараллельной к параллельной конфигурации. Величина вычисленной через электронные плотности поляризации пленок после переворота $P_s = 0.65$ и оказывается в 2 раза выше экспериментально полученных значений спиновой поляризации для кобальта $P_s^{\text{exp}} = 0.35$ [1]. Это обусловлено не учетом влияния эффектов туннелирования на электронные плотности пленок. Уточнение этих эффектов будет целью последующих исследований.

При применении формул (2) и (3) нами были получены зависимости коэффициента туннельного магнитосопротивления δ от магнитного поля h , представленные на рис. 2.

Считая спиновые поляризации P_1 и P_2 плёнок равными P_s , можно вычислить их значения на основе формулы (3) из рассчитанных значений магнитосопротивления. График зависимости этой величины представлен на рис. 1. Значение спиновой поляризации параллельной конфигурации в этом случае равняется $P_s = 0.48$, которая оказывается ближе к P_s^{exp} [1].

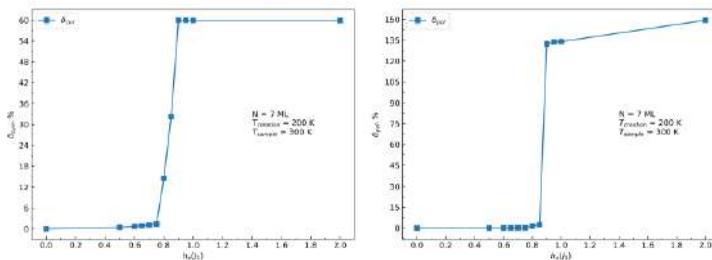


Рисунок 2. Зависимость магнитосопротивления от магнитного поля h , полученные в соответствии с формулами (2) (слева) и (3) (справа).

Анализ графиков магнитосопротивления (рис. 2) показывает, что величина туннельного магнитосопротивления, полученная через спиновую поляризацию (справа), в 2 раза выше полученной через токовые плотности (слева). Однако полученная зависимость хорошо соотносится с результатами предыдущих работ по исследованию гигантского магнитосопротивления.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 23-22-00093.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Физика магнитных материалов и наноструктур / Под ред. *В.В. Устинова, Н.В. Мушеникова, В.Ю. Ирхина*. — Екатеринбург: Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, 2020. — 664 с.
- [2] *Прудников В.В., Прудников П.В., Романовский Д.Е.*, Письма в ЖЭТФ **102**, 759 (2015).
- [3] *Butler W.H.*, Sci. Technol. Adv. Mater. **9**, № 1. 014106 (2008).

Черноок Егор Константинович, egor.chernook@yandex.ru

Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского, Физический факультет, 1-й курс магистратуры. 644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Исследование универсальных свойств критического поведения спиновых систем с применением методов машинного обучения

А. А. Чубарова

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М.В. Мамонова

Аннотация. В статье рассмотрено применение методов машинного обучения к спиновым системам на примере точно решаемой двумерной модели Изинга. Проведен для данной модели расчет корреляционной длины и скейлинговых зависимостей на основе данных, полученных нейронной сетью.

Ключевые слова: машинное обучения, свёрточная нейронная сеть, модель Изинга, скейлинг, корреляционная длина.

Методы машинного обучения получили широкое распространение благодаря своему применению к различным прикладным задачам [1,2]. В физике критических явлений методы машинного обучения используются для идентификации и классификация фазовых переходов, предполагая отсутствие предварительных знаний [3]. Для исследования фазовых переходов в спиновых системах традиционно используют отдельный класс алгоритмов машинного обучения - свёрточные нейронные сети [4,5].

В данной работе исследовались универсальные свойства критического поведения спиновых систем с применением методов машинного обучения и алгоритма Метрополиса [6] к двумерной модели Изинга на квадратной решетке. Гамильтониан для квадратной решётки двумерной модели Изинга с состояниями спина $S = \pm 1$.

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j ,$$

где $J = 1$ – константа обменного взаимодействия, $J > 0$ для ферромагнитной модели. Число спинов в системе задавалось равное $N = L \times L$, где L - линейный размер решетки.

Компьютерное моделирование проводилось для $L = 16, 24, 32, 48, 64, 128$. Число шагов Монте-Карло, отводимых на релаксацию системы равнялось $MCS_{rel} = 30000$; число шагов

Монте-Карло, отводимых на усреднение $MCS_{av} = 50000$. Температурный диапазон $T \in [1.8; 2.9]$. Моделирование осуществлялось из низкотемпературного начального состояния. Тренировочный набор данных состоял из 200 статистических конфигураций, из них на 100 конфигурациях осуществлялось обучение.

Процесс обучения нейронных сетей осуществлялся на наборе данных корреляционных матриц [4], значения которых определялись для спиновых конфигураций.

$$C_i = \frac{1}{2} (S_{x,y} S_{x+\frac{L}{2},y} + S_{x,y} S_{x,y+\frac{L}{2}}),$$

где корреляционная функция учитывает взаимодействие спинов на расстоянии равным половине решётки.



Рисунок 1. Отрисованные корреляционные матрицы при разных температурах для линейного размера $L = 64$.

Выходной слой нейронной сети состоит из двух узлов, значение которых соответствуют вероятности обнаружить состояние системы в высокотемпературной (НТ, $T > T_C$) или в низкотемпературной (ЛТ, $T < T_C$) фазе. Функция скейлинга и расчёт корреляционной длины были построены на основе предсказания из низкотемпературной фазы.

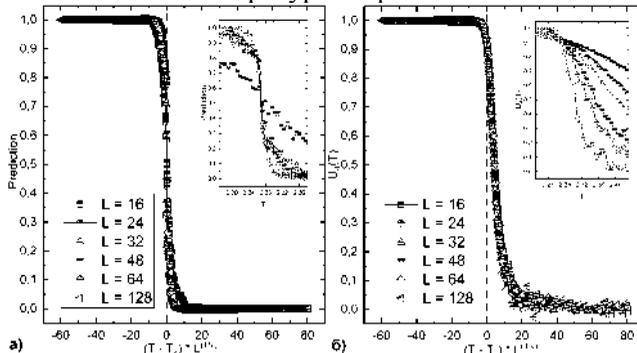


Рисунок 2. Скейлинговые зависимости двумерной модели Изинга для линейных размеров $L = 16, 24, 32, 48, 64, 128$, построенные а) методами машинного обучения; б) методами Монте-Карло.

На рис. 2. представлены скейлинговые зависимости двумерной модели Изинга, отражающие универсальное поведение для разных линейных размеров. Достаточно хорошо видно резкий спад кривых в области нуля, что соответствует поведению чистой модели Изинга с критическим индексом $\nu = 1,0$.

Корреляционная длина для модели Изинга с помощью нейронной сети рассчитывалась по формуле:

$$\xi_{net} \sim \ln(|\langle 1 - M_{LT} \rangle|),$$

где M_{LT} – выходной слой нейронной сети, соответствующий вероятности обнаружить систему в низкотемпературной фазе (LT).

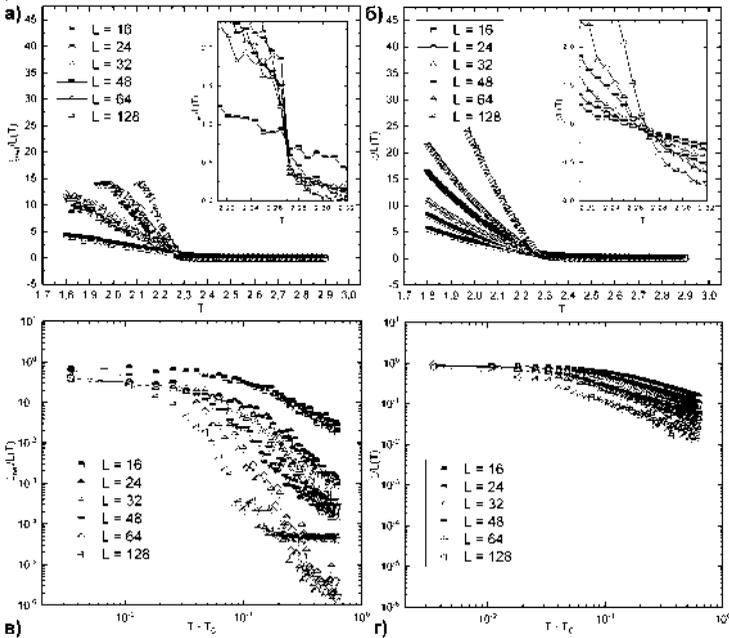


Рисунок 3. Температурные зависимости функций ξ_{net}/L и ξ/L в интервале $T \in [1.8; 2.9]$ (а, б) и в двойном логарифмическом масштабе в области $T - T_c$ (в, г).

Графики на рис. 3 демонстрируют поведение функции корреляционной длины, построенные разными методами. Можно

заметить, что поведение функция ξ_{net}/L отражает поведение функции ξ/L , хотя и больше подвержена флуктуациям.

В данной работе было проведено исследование универсальных свойств критического поведения точно решаемой двумерной модели Изинга с использованием свёрточной нейронной сети. В ходе работы были рассчитаны функции ξ_{net}/L и ξ/L при разных линейных размерах, демонстрирующий аналогичное поведение в области критической температуры. Показано, что метод классификации фазовых переходов применим к описанию критических свойств спиновых систем и позволяет определить критические индексы при построении функции скейлинга и расчёта корреляционной длины.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Leijnen S., Van Veen F.*, The Neural Network Zoo // Proceedings. V.47(1), 9 (2020)
- [2] *Rahmanian Koshkaki S., Allahyari Z., Oganov A.R., Solozhenko V.L.*, Computational prediction of new magnetic Materials // J. Chem. Phys. V.157, 124704 (2022)
- [3] *Shiina K., Mori H., Okabe Y., Lee H.K.*, Machine-Learning Studies on Spin Models // Sci. Rep. V. 10. 2177 (2020)
- [4] *Azizi A., Pleimling M.*, A cautionary tale for machine learning generated configurations in presence of a conserved quantity //Sci. Rep. V.11. 6395 (2021)
- [5] *Tanaka A., Tomiya A.*, A cautionary tale for machine learning generated configurations in presence of a conserved quantity // J. Phys. Soc. Jpn. V. 86, 063001 (2017).
- [6] *Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E.*, Equations of State Calculations by Fast Computing Machines // J. Chem. Phys. V.21, 1087 (1953)

Чубарова Алина Аркадьевна, ChubarovaAA@stud.omsu.ru
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Физический факультет, 1-й курс магистратуры.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Исследование кристаллической структуры $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ с использованием эволюционных алгоритмов

А. А. Чубарова

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М.В. Мамонова

Аннотация. В данной работе приведены результаты расчётов кристаллической интеркаляционной структуры $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ с применением эволюционных алгоритмов. Найден вариант лучшей структуры для немагнитного случая, в котором сохраняется октаэдральная форма соединения атомов Ti и Fe с атомами S. При исследовании магнитных конфигураций выявлено аномально большие значения магнитных моментов для атомов Ti, значения которых превышают, значения атомов Fe в 2 раза.

Ключевые слова: интеркаляционные соединения, эволюционные алгоритмы, USPEX, VASP

Интеркаляция [1] - введение гостевых атомов, ионов или молекул между слоями слоистых соединений, и результирующие вещества, полученные в процессе интеркаляции, называются "интеркаляционными соединениями" или "интеркалатами".

Подбор наиболее реальной модели кристаллической структуры является чрезвычайно сложной и трудоёмкой задачей, так как необходимо рассмотреть большое множество различных вариантов одной конкретной системы. В работах [2,3] описаны интересные особенности интеркалатов, где в зависимости от расположения и концентрации интеркалируемого материала менялось состояние всей системы. Наиболее интересным примером таких интеркаляционных материалов являются Fe_xTiS_2 и Fe_xTaS_2 , где достаточно хорошо видно влияние концентрации интеркалируемого Fe на поведение всей системы, особенно на магнитное состояние.

В данной работе проводились расчёты кристаллической структуры Fe_xTiS_2 с концентрацией атомов железа $x = 0.33$ и исследовались ее магнитные и энергетические свойства. Моделировались 50 поколений по 30 структур эволюционными

алгоритмами USPEX [4] в каждом и оптимизировались с помощью программного комплекса VASP [5].

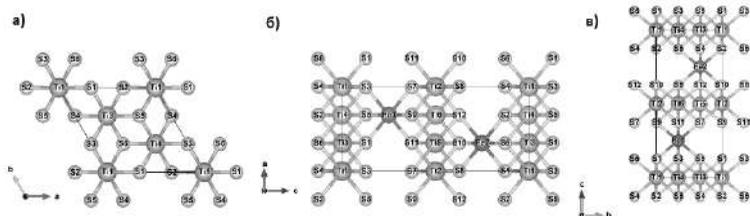


Рисунок 1. Кристаллическая структура $Fe_{1/3}TiS_2$ [6] в разных проекциях.

На рис. 1, 2 представлены исходная (рис. 1) и лучшая структуры для немагнитной конфигурации. В качестве лучшей алгоритмом выбиралась наиболее стабильная структура. Можно заметить, что полученная структура идентична исходной, за исключением незначительного сдвига слоёв, содержащих Ti и увеличения угла наклона суперъчейки в плоскости векторов *b* и *c* с примерно на 20°-30°. Стоит отметить, что соединение атомов Ti – S и Fe – S в полученной структуре, сохранили вид октаэдра.

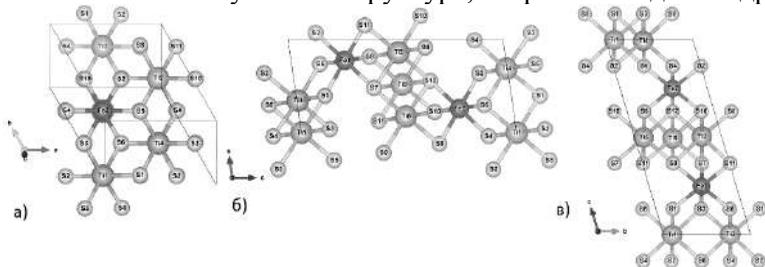


Рисунок 2. Лучшая структура, выбранная алгоритмом USPEX с применением программы оптимизации VASP в разных проекциях.

Для исследования магнитных свойств данной системы были проведены расчёты с учётом намагничённости атомов Fe. Проводились два расчёта для исследования магнитной конфигурации: по поиску структур с минимальными и максимальными значениями магнитным моментами.

Можно заметить, что итоговая структура при учёте магнитных атомов абсолютно не похожа на исходную.

Предположительно, такой результат мог получиться из-за сильного влияния спиновой мутации, хотя во входных параметрах, задающих её влияние, было указано всего 10 %. Стоит также отметить, что полученная структура отличается от структуры, полученной при расчёте немагнитной конфигурации (рис. 1). У полученной структуры не наблюдается октаэдральной формы соединения атомов Ti – S.

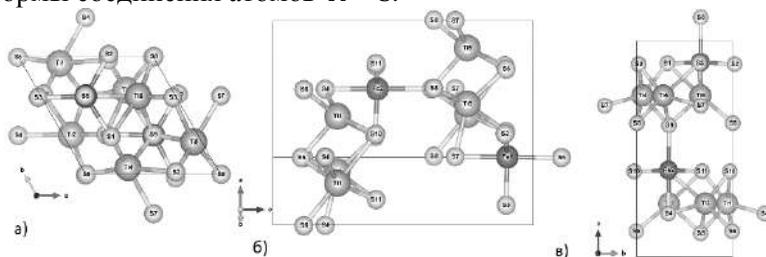


Рисунок 3. Лучшая структура в разных геометрических проекциях, при минимизации магнитных моментов.

Таблица 1. Значения магнитных моментов для структуры Fe_xTiS_2 при минимизации магнитных моментов. Значения приведены в μ_B .

Fe1			Fe2		
-0,256			0,256		
Ti1	Ti2	Ti3	Ti4	Ti5	Ti6
0,394	0,465	0,453	-0,452	-0,465	-0,394
S1	S2	S3	S4	S5	S6
-0,002	0,007	-0,001	-0,018	-0,017	0,026
S7	S8	S9	S10	S11	S12
0,018	-0,026	0,017	0,002	0,001	-0,007

Таблица 2. Значения магнитных моментов для структуры Fe_xTiS_2 при максимизации магнитных моментов. Значения приведены в μ_B .

Fe1			Fe2		
1,611			1,611		
Ti1	Ti2	Ti3	Ti4	Ti5	Ti6
2,170	2,170	2,181	2,181	2,181	2,181
S1	S2	S3	S4	S5	S6

-0,002	-0,002	-0,002	-0,002	-0,002	-0,002
S7	S8	S9	S10	S11	S12
-0,002	-0,002	-0,002	-0,002	-0,002	-0,002

Результаты расчетов, приведённые в таблицах 1,2 для разных магнитных конфигураций, демонстрируют аномально большие значения магнитных моментов для атомов Ti, которые превышают значения для атомов Fe в 2 раза.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Motizuki, K., Suzuki, N.*, Intercalation Compounds of Transition-Metal Dichalcogenides // Springer Series in Materials Science, 1994, P.106-138.
- [2] *McGuire T., Potter R.L.*, Anisotropic magnetoresistance in ferromagnetic 3d alloys // IEEE Trans. on Magn., 1975, V.11, 1018.
- [3] *Choe J., Lee K., Huang C.L., Trivedi N., Morosan E.*, Magnetotransport in Fe-intercalated TS2: Comparison between T = Ti and Ta // Phys. Rev. 2019, V.99, 064420
- [4] *Glass C.W., Oganov A.R., Hansen N.* USPEX – evolutionary crystal structure prediction // Cosmp. Phys. Comm. 2006. V.175, P.713-720.
- [5] *Kresse P.G., Furthmuller J.*, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev., 1996, V.54, 11169.
- [6] *Selezneva N.V., Sherokalova E.M., Podlesnyak A., Frontzek M., Baranov N.V.*, Relationship between magnetoresistance behavior and magnetic states in intercalated compounds Fe_xTiS_2 // Phys. Rev. Materials, 2023, V.7, 014401.

Чубарова Алина Аркадьевна, ChubarovaAA@stud.omsu.ru
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Физический факультет, 1-й курс магистратуры.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Первопринципные расчеты магнитных свойств сплава CoPt

Г. В. Шароглазов

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент М. В. Мамонова.

Аннотация. В рамках первопринципных расчетов с использованием программного комплекса VASP были проведены исследования модели сплава Co/Pt с применением функционалов GGA, GGA+U и meta-GGA. Представлены результаты расчетов магнитных характеристик сплава Co/Pt со структурным упорядочением типа $L1_0$. Построены проектируемые плотности состояний.

Ключевые слова: VASP, сплав CoPt, магнитные моменты, первопринципные расчеты, GGA+U, meta-GGA.

Структурам на основе кобальтовых сплавов нашли широкое применение в современных устройствах нанoeлектроники, магнитных носителях информации, биологических и медицинских целях [1]. Среди биметаллических сплавов, CoPt со структурным упорядочением типа $L1_0$ привлек особое внимание, благодаря высокой термической стабильности и устойчивости к коррозии и окислению [2,3], что является важными факторами для носителей высокой плотности записи [4].

Однако, теоретическое изучение систем с платиновыми металлами затруднительно. Они обладают высокой плотностью, что сказывается на скорости работы вычислительных методов.

Для расчета электронных свойств конденсированных систем широко используется Метод функционала плотности Кона-Шэма. Благодаря своей вычислительной эффективности и точности, он обеспечивает получение значений, соответствующих экспериментальным данным.

В данной работе исследовались магнитные характеристики биметаллического сплава Co/Pt со структурным упорядочением типа $L1_0$ с использованием функционалов PBE (GGA), PBE+U(GGA+U) и SCAN(meta—GGA), реализованных в пакете моделирования Vienna ab-initio (VASP) [5].

Для расчётов с применением PBE+U потенциала были выбраны значения эффективного $U(U_{\text{eff}}) = U - J$; 1.9 и 0.8 эВ соответственно. Данные значения были выбраны исходя из данной работы [6]. Для самосогласованных расчетов энергия обрезания плоских волн была выбрана равной 550 эВ. Использовалась сетка Монкхорста-Пака $12 \times 12 \times 12$ с k-точками разбиения в первой зоне Бриллюэна. Значение постоянной решётки $a = 5.08$ а.е. и для $c/a = 1.3800$ оба параметра соответствуют слегка сжатым ячейки вдоль оси c по отношению к идеальной гранецентрированной решетке.

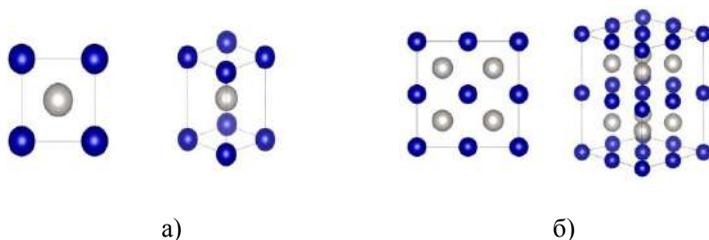
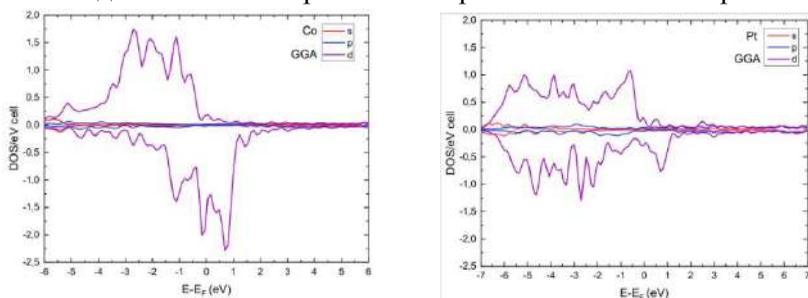
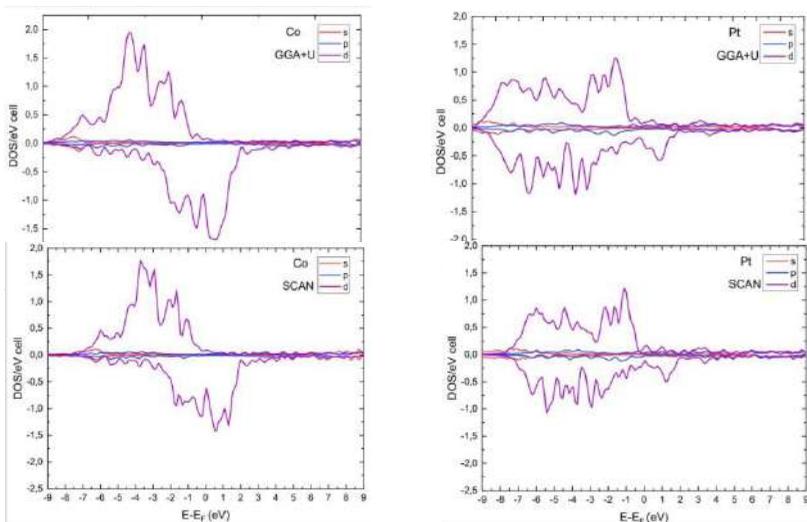


Рисунок. 1. Кристаллическая структура сплава Co/Pt в двух проекциях а) элементарная ячейка; б) транслированная $2 \times 2 \times 2$ ячейка.

Проекция атомов в $L1_0$ структуре Co-Pt: атомы Co находятся в углах, а Pt - в центре тела. Пространственная группа структуры $P4/mmm$. Из проекций спиновых плотностей рис. 2. для элементов Co и Pt в одиночной ячейке следует, что главный вклад в магнитные моменты обусловлен наличием электронов на d-орбиталях ионов кобальта. При этом, повышенное значение на d-орбиталях ионов платины может быть связано с взаимодействием электронов на d-орбиталях обоих материалов.





а)

б)

Рисунок. 2. Проекция плотностей состояний (PDOS) полученных с помощью GGA, GGA+U и meta-GGA для а) Co; б) Pt.

Были рассчитаны магнитные моменты системы Co/Pt для одиночной и транслированной $2 \times 2 \times 2$ ячейки, с использованием функционалов: PBE, PBE+U и SCAN. Начальный магнитный момент для атомов кобальта был выбран равный $1.5 \mu_B$.

Таблица. 1. Значения магнитного момента общего и приходящегося на атом для неколлинеарного — ncl и коллинеарного случае в единичной ячейки.

	$\mu_{\text{общий}}(\mu_B)$	$\mu_{\text{Co}}(\mu_B)$	$\mu_{\text{Pt}}(\mu_B)$
GGA	2,286	1,89	0,396
GGA ncl	2,283	1,888	0,395
GGA + U	2,404	2,051	0,354
GGA + U ncl	2,402	2,05	0,352
meta -GGA SCAN	2,479	2,162	0,316
meta -GGA SCAN ncl	2,455	2,145	0,31
эксперимент [7]	2,11	1,76	0,35

Таблица. 2. Значения магнитного момента общего и приходящегося на атом для неколлинеарного — ncl и коллинеарного случая транслированной $2 \times 2 \times 2$ ячейки.

	$\mu_{\text{общий}}(\mu_B)$	$\mu_{\text{Co}}(\mu_B)$	$\mu_{\text{Pt}}(\mu_B)$
--	-----------------------------	--------------------------	--------------------------

GGA	2,280875	1,894	0,387
GGA ncl	2,2785	1,891	0,387
GGA + U	2,3975	2,054	0,343
GGA + U ncl	2,409625	2,049	0,361
meta -GGA SCAN	2,47925	2,159	0,32
эксперимент [7]	2,11	1,76	0,35

Значение магнитного момента атома Со и общего магнитного момента наиболее близко к экспериментальному при использовании GGA функционала. Однако значение магнитного момента атомов Pt, полученных при помощи GGA, выше экспериментального. Наиболее точные результаты для магнитного момента атома Pt были получены с использованием GGA + U функционала.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Liu Y., Yang Y., et al.* A facile route to synthesis of CoPt magnetic nanoparticles. // *Mater. Res. Bull.* 2013. 48. 2. 721-724.
- [2] *Liu X.B., Altounian Z.* Exchange interaction in L10-ordered FePt and CoPt from first-principles.// *J. Appl. Phys.* 2011. 109. 07B762.
- [3] *Klarstrom, Crook P., Sharif A.* Cobalt Alloys: Alloying and Thermomechanical Processing // *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*, Elsevier. 2017.
- [4] *Zheng Cui, Rothman J., Klauw M., Lopez-Diaz L., Vaz C.A.F., Bland J.A.C.* Fabrication of magnetic rings for high density memory devices. // *Microelectron. Eng.* 2002. Vol. 61-62. P. 577-583.
- [5] *Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized Gradient Approximation Made Simple. // *Phys. Rev. Lett.* 1996. 77(18), 3865.
- [6] *Manh Cuong Nguyen et al* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2018. **30** 195801
- [7] *Grange W., Galanakis I., Alouani M., Maret M., Kappler J.-P. and Rogalev A.* // *Phys. Rev. B* 62, 1157 – 2000

Шароглазов Георгий Вячеславович, sharoglazovgv@stud.omsu.ru
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Физический факультет, 1-й курс магистратуры.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Моделирование методом Монте-Карло магнитных свойств спин-вентильных наноструктур

А. Е. Егорина

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. П. В. Прудников

Аннотация. Исследовано методами Монте-Карло неравновесное поведения спин-вентильных магнитных наноструктур на основе применения анизотропной модели Гейзенберга к описанию магнитных свойств ультратонких ферромагнитных пленок. Получена временная зависимость намагниченности и автокорреляционной функции. Обнаружены эффекты старения.

Ключевые слова: спиновые вентили, автокорреляционная функция, эффекты старения, неравновесное поведение.

Повышенный интерес ученых к ультратонким магнитным пленкам вызван их свойствами, отличающимися от свойств объемных материалов. Ультратонкие пленки из магнитных металлов и сплавов являются составляющими элементами магнитных сплавов магнитных спин-вентильных структур, которые активно применяются в устройствах с эффектами гигантского магнитосопротивления (ГМС) [1]. Спиновые вентили находят широкое применение в микроэлектронике, вычислительной физике, клинической биомедицине [2]. Осуществлено моделирование методом Монте-Карло усложненных спиновых систем, описываемых трехмерной анизотропной моделью Гейзенберга. Структуры с намагниченностью перпендикулярной плоскости пленок описаны гамильтонианом [3]:

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

где S_i^x , S_i^y , S_i^z - компоненты трехмерного единичного вектора спина, закрепленного в i -ом узле ГЦК-решетки, $\Delta_2(N)$ – параметр, учитывающие эффективное влияние магнитной анизотропии типа «легкой плоскости» ($\Delta_2(N)$), J_{ij} – обменный интеграл, характеризующий взаимодействие ближайших спинов, параметр

$h=g\mu_B H$ описывает влияние внешнего магнитного поля, ориентированного перпендикулярно плоскости пленок (вдоль оси z).

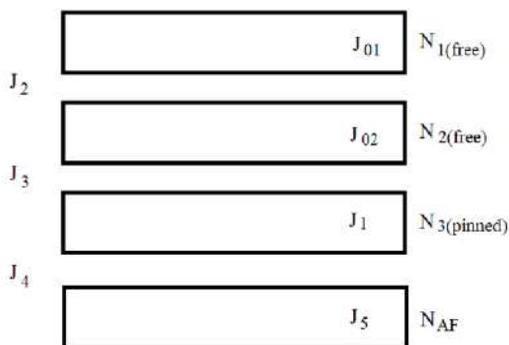


Рисунок 1. Модель усложненного спинового вентиля.

Проведено моделирование неравновесного поведения усложненного спинового вентиля (рис. 1), описываемого трехмерной анизотропной моделью Гейзенберга с анизотропией типа “легкая плоскость”.

На графике рис. 2 показана зависимость автокорреляционной функции от времени наблюдения, которая характеризует поведение релаксации. Данный график демонстрирует поведение системы, где при увеличении времени ожидания процесс релаксации системы происходит в более длительный промежуток времени. То есть чем дольше “готовится” образец, тем дольше он релаксирует. Из этого следует, что в данной зависимости в усложненной спин-вентильной структуре наблюдаются эффекты старения.

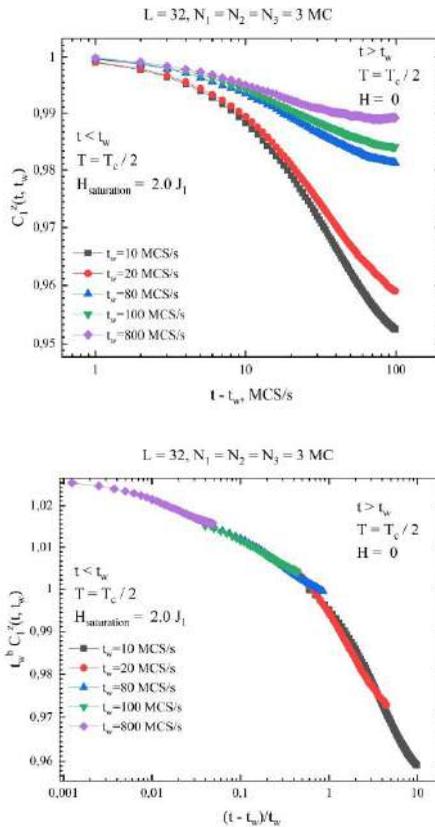


Рисунок 2. Временная зависимость автокорреляционной функции в спин-вентильной.

Данные зависимости дают универсальную картину эффектов старения, поэтому следующим этапом работы было построение динамического скейлинга, представленного. Скейлинговая зависимость намагниченности от времени, характеризующаяся наложением кривых на графике, подтверждает наличие эффектов старения, представленных на графике рис. 2.

Была показана зависимость автокорреляционной функции от времени наблюдения), которая характеризует поведение

релаксации системы. Было продемонстрировано поведение системы, где при увеличении времени ожидания процесс релаксации системы происходит в более длительный промежуток времени. Из этого следовало, что в данной зависимости в усложненной спин-вентильной структуре наблюдаются эффекты старения. Для подтверждения выявленных эффектов старения системы были построены динамические скейлинговые зависимости. Данные зависимости подтвердили наличие эффектов старения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Vaz C.A.F, Bland J.A.C., Lauhoff G.* Magnetism in ultrathin film structures // *Rep. Prog. Phys.* 2008. Vol. 71 056501.
- [2] *Djamel M., Ramli, Haryanto F. and Khairurrijal.* Biosensors for Health, Environment and Biosecurity, - С.6.- P.150. - 2011.
- [3] *Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Mamonova M.A., Piskunova N.I.* Influence of anisotropy on magnetoresistance in magnetic multilayer structures // *J. Magn. Magn. Matter.* 2019. Vol. 482. P. 201-205.

Егорина Анастасия Сергеевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
anastasia.sergeevna.egorina@gmail.com

Особенности проявления медленной динамики в магнитосопротивлении спин-вентильных наноструктур

Ю. К. Евстафьева

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В. В. Прудников

Аннотация. Исследована двухвременная зависимость магнитосопротивления спин – вентильных наноструктур. Выявлены особенности влияния типа мультислойной структуры, начальных температур, температур замораживания, толщин пленок на значения магнитосопротивления.

Ключевые слова: спиновые вентили, магнитосопротивление, эффекты старения, неравновесное поведение.

Проведенные экспериментальные [1] и численные [2, 3] исследования релаксации намагниченности и временного поведения корреляционных функций выявили в магнитных структурах Co/Cr и Co/Cu эффекты старения, которые характеризуются замедлением релаксационных и корреляционных свойств системы с ростом времени ожидания и проявляются в широком температурном интервале с $T \leq T_c$. Исследования [3, 4] демонстрируют, что сложное двухвременное поведение магнитосопротивления обусловлено медленной спиновой динамикой в таких структурах.

В данной работе представлено Монте-Карло исследование неравновесного поведения спин-вентильных наноструктур Co/Cu(001)/Co/АФ, в которых намагниченность одной из ферромагнитных пленок Co закреплена соседним слоем антиферромагнетика (АФ).

Рассматриваются магнитные структуры с толщинами ферромагнитных пленок $N=3 \div 9$ МС. Размер структуры $L \times L \times N$ с наложенными периодическими граничными условиями в плоскости пленки. Значения обменных интегралов внутрислоевого взаимодействия $J_1/k_B T=1$, а межслоевого взаимодействия $J_2/J_1=0.01$. Температура T системы измеряется в единицах обменного интеграла J_1/k_B . Ослабление величины

межслоевой обменной связи обеспечивает низкие поля насыщения в спиновых вентилях.

Магнитные свойства наноструктур описываются анизотропной моделью Гейзенберга [5], задаваемой для структуры с намагниченностью ориентированной в плоскости пленки, гамильтонианом

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

В (1) $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор спина, зафиксированный в i -ом узле ГЦК-решетки пленок кобальта, $\Delta(N)$ – параметр, учитывающий эффективное влияние магнитной анизотропии [5]. $B = 0.8$ – параметр обменной анизотропии для задания преимущественного направления спинов вдоль оси Ох.

Моделирование неравновесной двухвременной зависимости магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ [3, 4] проводится с использованием разработанной в работе [6] методики. На рис. 1 показано проявление эффектов старения, т.е. зависимости магнитосопротивления от времени ожидания t_w . Наблюдается рост значений магнитосопротивления на плато $\delta^\infty(N, T_s)$ с увеличением толщин ферромагнитных пленок N и понижением температур замораживания T_s . Выявлено отсутствие влияния начальных температур T_0 на асимптотические значения магнитосопротивления $\delta^\infty(N, T_s)$, обусловленное воздействием поля обменного смещения со стороны пленки антиферромагнетика. При этом зависимость от температуры замораживания T_s сохраняется, и значения магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ растут с понижением температуры замораживания T_s .

Отметим, что ранее [8] для трехпленочной структуры было выявлено существенное влияние начальных состояний с различными T_0 на временные зависимости магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$.

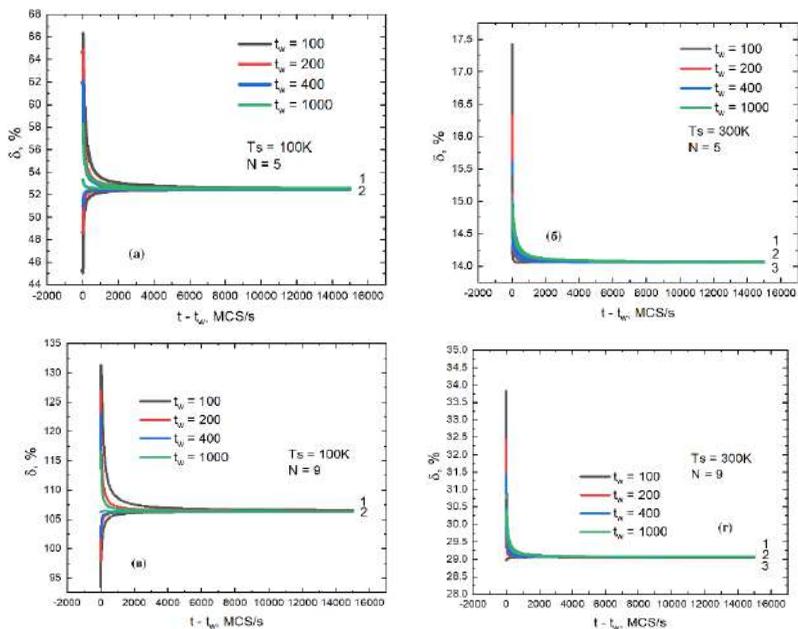


Рисунок 1. Временная зависимость ТПП-магнитосопротивления в спиновом вентиле Co/Cu/Co/АФ с толщинами пленок кобальта (а) и (б) $N=5$, (в) и (г) $N=9$ МС при температурах замораживания $T_s=100$ К (а, в) и $T_s=300$ К (б, г) для времен ожидания $t_w=100, 200, 400, 1000$ МС/с при эволюции из начальных состояний с температурами: (а) 1 - $T_0=0$ К, 2 - $T_0=200$ К; (б) 1 - $T_0=0$ К, 2 - $T_0=200$ К, 3 - $T_0=400$ К; (в) $T_0=0$ К, 2 - $T_0=200$ К; (г) 1 - $T_0=0$ К, 2 - $T_0=200$ К, 3 - $T_0=400$ К.

Времена выхода магнитосопротивления $\delta(t, t_w)$ на плато для рассмотренных структур принимают значения $1000 \div 4000$ МС/с, что соответствует $10^5 \div 10^6$ с или 3 - 10 часам.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 23-22-00093.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Mukherjee T., Pleimling M., Binek C., Phys. Rev. B **82**, 134425 (2010).

- [2] Прудников В.В., Прудников П.В., Пуртов А.Н., Мамонова М.В., Письма в ЖЭТФ, **104**, 797 (2016).
- [3] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Mamonova M.V., Firstova M.M., Samoshilova A.A., J. Phys. Commun., **3**, 015002 (2019).
- [4] Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В., ЖЭТФ **154**, 855 (2018)
- [5] Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Menshikova M.A., Piskunova N.I., JMMM **387**, 77 (2015).
- [6] Прудников В.В., Прудников П.В., Романовский Д.Е., Письма в ЖЭТФ **102**, 759 (2015).
- [7] Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Mamonova M.V., Piskunova N.I., JMMM **482**, 201 (2019).
- [8] Евстафьева Ю.К., Мамонова М.В., Прудников В.В., Прудников П.В. Вестн. Ом. ун-та. **26**. № 2. С. 40-51 (2021).

Евстафьева Юлия Константиновна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
yuliaevstafyeva@gmail.com

Исследование влияния точечных типов дефектов на эффекты гистерезиса в мультислойных наноструктурах

Р. С. Шакиров

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В. В. Прудников

Аннотация. Осуществлено исследование методами компьютерного моделирования Монте-Карло влияния точечных типов дефектов структур на эффекты гистерезиса в мультислойных наноструктурах, описываемых анизотропной моделью Гейзенберга. На основе анализа зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля было получено, что с увеличением концентрации точечных дефектов уменьшается коэрцитивная сила. Мультислойные структуры с точечными дефектами демонстрировали скачок намагниченности при перемагничивании образца в зависимости от концентрации дефектов в структуре.

Ключевые слова: гистерезис, метод Монте-Карло, мультислойные наноструктуры, дефекты структуры.

Физика ультратонких магнитных пленок, толщиной от одного до нескольких десятков монослоев является предметом активных исследований в течение последних десятилетий [1]. Мультислойные структуры, состоящие из сверхтонких ферромагнитных пленок разделены немагнитными слоями. Толщины немагнитных слоев выбраны таким образом, чтобы дальнедействующее обменное РККИ взаимодействие имело эффективный антиферромагнитный характер. Благодаря этому взаимодействию намагничивание соседних ферромагнитных пленок ориентируется противоположно друг другу. Когда данная структура помещается во внешнее магнитное поле, намагничивание пленок начинает ориентироваться параллельно [2]. Это приводит к значительному увеличению электрического сопротивления. Благодаря данному свойству, мультислойные структуры широко используются в качестве считывающих головок жестких дисков, устройств спинтроники и датчиков.

В данной работе методами компьютерного моделирования было проведено исследование влияния точечных типов дефектов на магнитные свойства мультислойных наноструктур. Исследуемая модель состоит из двух ферромагнитных пленок размером $L \times L \times N$ с толщиной $N = 4$ монослоя (МС) описываемой анизотропной моделью Гейзенберга. Параметры моделирования задаются в единицах обменного интеграла внутрислоевого взаимодействия $J_1 = 1.0$, а значение интеграла межслоевого взаимодействия $J_2 = -0.5 J_1$, при значении температуры $T = 0.6, 0.8 J_1/k_B$.

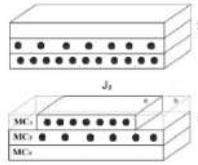


Рисунок 1. Модель мультислойной структуры в которой в первых и во-вторых слоях обеих пленок были введены дефекты представляющие собой немагнитную примесь.

Гамильтониан для системы с точечными дефектами:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j \left[(1 - (\Delta N)) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right] - J_2 \sum_{\langle \alpha \in N_1, \beta \in N_2 \rangle} p_\alpha p_\beta \left[(1 - (\Delta N)) (S_\alpha^x S_\beta^x + S_\beta^y S_\alpha^y) + S_\alpha^z S_\beta^z \right] - h \sum_{\langle i \in N_1, N_2 \rangle} S_i^z$$

В качестве параметра спиновой концентрации p в первых слоях каждой плёнки p_1 и во вторых слоях p_2 . В остальных слоях спиновая концентрация $p = 1$. В моделировании использовались следующие конфигурации $p_1 = 0.75-0.35$, $p_2 = 0.80$ и $p_1 = 0.75-0.35$ $p_2 = 1.00$.

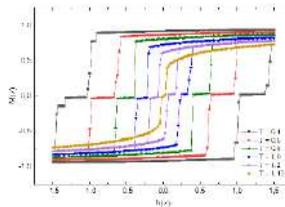


Рисунок 2. Результаты моделирования петли гистерезиса для модели состоящей из двух ферромагнитных плёнок толщиной 4 МС

разделённых плёнкой немагнитного металла при температуре $T = 0.4, 0.8, 1.0, 1.2, 1.435 \text{ J/k}_B$.

Данные графики показывают, что есть прямая зависимость между увеличением температуры и коэрцитивной силой, которая показывает, в какой степени затруднены процессы перемагничивания в ферромагнитных материалах. Чем выше температура, тем ниже коэрцитивная сила. Процессы насыщения системы при увеличении значения поля $h(z)$ продолжаются. Присутствует ступенька при $M = 0$, свидетельствующие о наличии промежуточного состояния.

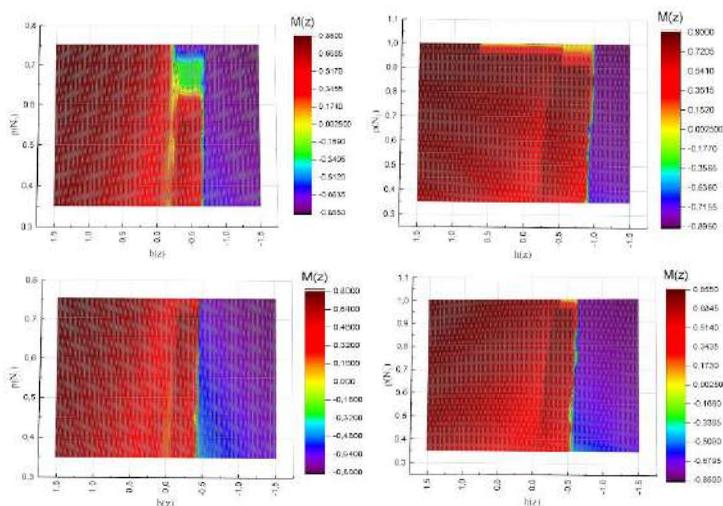


Рисунок 3. Результаты намагниченности первого слоя в системе с точечными дефектами при значениях спиновой концентрации $p_1 = 0.75-0.35$ $p_2 = 0.80$ и $p_1 = 0.75-0.35$ $p_2 = 1.00$ при толщине пленок равным $N = 4$ МС при температурах $T = 0.6, 0.8 \text{ J/k}_B$.

Данные графики показывают, что отсутствует ступенька при $M = 0$, свидетельствующая нам о том, что промежуточное состояние отсутствует из-за неидеального интерфейса. Насыщение ферромагнитных пленок продолжается при гораздо больших значениях поля. Переключение слоёв при введении дефектов в виде немагнитной примеси происходит намного

быстрее, чем в модели без дефектов. При толщине слоя $N = 4$ МС и при концентрации дефектов в первом слое $p_1 = 0.65$ при $T = 0.6$ в процессе переключения пленок у нас возникает скачкообразное изменение намагниченности. Это происходит за счет того, что у нас образуются кластеры, которым энергетически выгодно не изменять свое состояние, и им требуются куда большие поля для их переключения, нежели для систем без дефектов. И в зависимости от концентрации дефектов такое поведение наблюдается более выражено и наблюдается в случае, когда петля схлопывается при высокой концентрации немагнитной примеси. При увеличении температуры $T = 0.8$ наблюдается увеличения влияния дефектов, вследствие этого скачкообразное изменение намагниченности возникает при гораздо меньших концентрациях дефектов. Для температуры $T = 0.8$ при введении дефектов в модель коэрцитивная сила уменьшилась, вследствие того, что спинам, находящимся вблизи дефектов, легче изменить своё состояние. Это происходит за счёт увеличения количества соседей дефектов, которые будут давать нулевой вклад в энергию. Из-за этого вероятность переворота спина увеличивается.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Bersweiler M., Lacour D., Dumesnil K., Montaigne F., Hehn S.* Phase diagram in exchange-coupled CoTb/[Co/Pt] multilayer-based magnetic tunnel junctions // *Phys. Rev. B* 2015. V. 92. pp. 224431.
- [2] *Grunberg P., Schreider R., Pang Y., Brodsky M.B., Sowers H.* Layered Magnetic Structures: Evidence for Antiferromagnetic Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers // *Phys. Rev. Lett* 1986. V. 57. pp. 2242.

Шакиров Роман Сергеевич, shakirovromanomsk@mail.ru.
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Физический факультет, 1-й курс магистратуры.
644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

Численное моделирование спиновых стёкол с РККИ взаимодействием

Л. А. Грязнов

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор А.Н. Вакилов

Аннотация. В данной работе с помощью методов компьютерного моделирования, основанных на методах Монте-Карло, было проведено исследование спиновых стёкол с РККИ взаимодействием.

Ключевые слова: спиновые стёкла, РККИ взаимодействие, методы Монте-Карло, компьютерное моделирование.

При исследовании спиновых стёкол, особый интерес представляет нахождения основного состояния системы. Поиск состояния с меньшей энергией затрудняет его вырожденная структура.

Линейный размер системы $L = 8$. Решётка имеет треугольную структуру. Моделирование проводилось из высокотемпературной фазы при $T = 5$. Отрезок температур от $T = 0,1$ до $T = 1$. Система находилась на каждой температуре 1000 шагов Монте-Карло.

Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -\sum_{i,j} J_{i,j} S_i S_j \quad (1)$$

Где $J_{i,j}$ - матрица обменного взаимодействия. Спины S_i и S_j принимают значения +1 и -1. В данной работе обменный интеграл на основе РККИ взаимодействия, которое используется для объяснения сложных магнитных фаз [1], вычислялся по формуле 2. Где C — интенсивность взаимодействия, r — расстояние между соседями. k_f - волновой вектор. Для ближайших соседей расстояние $r = 1$, для последующих $r = 2$. $k_f = 1,71 \times 10^{-8} \text{ см}^{-1}$ — значение для железа.

$$J = C \frac{2rk_f \cos(2rk_f) - \sin(2rk_f)}{(2rk_f)^4} \quad (2)$$

В работе вычислялись следующие величины:

$$E = -\frac{1}{N} \sum_{i,j} J_{i,j} S_i S_j \quad (3)$$

$$M = \frac{1}{N} \sum_i S_i \quad (4)$$

$$M_{stg} = M_1 - M_2 \quad (5)$$

(2) – средняя энергия на спин, (3) – средняя намагниченность, (4) – шахматная намагниченность.

На рисунке 1 мы можем наблюдать затухающие колебания обменного взаимодействия с увеличением расстояния, что соотносится с теорией [2].

На рисунке 2 показана средняя энергия на спин. Видно, что при приближении к нулю идёт быстрый спад энергии системы.

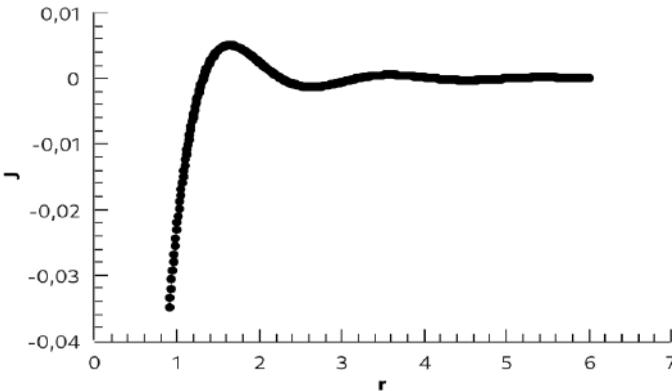


Рисунок 1. Зависимость обменного взаимодействия J от расстояния r .

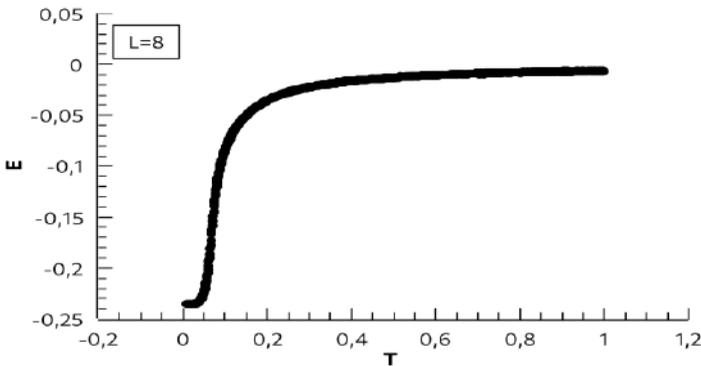


Рисунок 2. Зависимость энергии от температуры.

На рисунке 3 видно поведение средней намагниченности, по мере приближения к нулю значение возрастает.

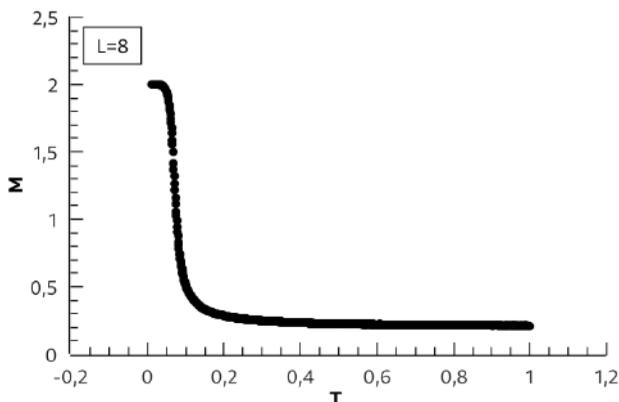


Рисунок 3. Зависимость намагниченности от температуры

В данной работе было проведено компьютерное моделирование Изингово спинового стекла с треугольной решёткой и РККИ взаимодействием. Получены зависимости энергии, намагниченности и шахматной намагниченности для системы линейным размером $L = 8$, получена зависимость обменного взаимодействия от расстояния.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Goro Shibata, Choongjae Won*. Large Orbital Magnetic Moment and Strong Perpendicular Magnetic Anisotropy in Heavily Intercalated Fe_xTiS_2 // J. Phys. Chem. C 2021, 125, 12929–12936
- [2] *Трухан С.Н., Мартьянов О.Н.* Магнитные свойства вещества. Часть 1 Основы строения. Новосибирск: Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 2012, 75 с.

Грязнов Леонид Анатольевич, leonidg700@gmail.com.

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Физический факультет, 2-й курс магистратуры. 644077, г. Омск, пр. Мира 55а, (3812) 647787.

**Секция
«ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА»**

**Измерение пьезомодуля пленок нитрида алюминия на
основе прямого пьезоэффекта**

А. Ю. Куклев

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В. И. Струнин

Аннотация. В работе представлены результаты измерения продольного пьезомодуля d_{33} в пленках нитрида алюминия, сформированных методом вакуумного магнетронного распыления. Представлена схема измерительного узла для проведения исследований пьезоэлектрических свойств пленок нитрида алюминия.

Ключевые слова: магнетронное распыление, нитрид алюминия, пьезоэлектрический эффект.

Нитрид алюминия (AlN), ввиду ряда физических свойств является очень перспективным материалом для создания на его основе тонкопленочных микроакустоэлектронных устройств поддерживающих стабильную работу на сверхвысоких частотах (СВЧ) в диапазоне 1–20 ГГц. Такими устройствами являются резонаторы на поверхностных (ПАВ) и объемных (ОАВ) акустических волнах. Эти устройства в дальнейшем используются в системах связи, при построении полосовых фильтров, устройствах генерации и селекции частот [1].

Качество получаемых пленок напрямую связано с рабочими характеристиками устройств разрабатываемых на их основе. Поэтому интерес в данной работе обусловлен получением пленки нитрида алюминия с заданными физическими характеристиками для создания на её основе ОАВ-резонатора.

Разрабатываемая методика измерения пьезоэлектрических свойств основывается на прямом пьезоэлектрическом эффекте. Суть методики заключается в том, что на образец (пленка AlN сформированная на подслое алюминия) с использованием

микротвердомера модели ПМТ-3 подается заданная нагрузка. В следствии прямого пьезоэлектрического эффекта на электродах образуется разность потенциалов, фиксирующаяся вольтметром [2].

Для проведения измерений разработана конструкция измерительного узла, с двумя электродами, контактирующими с пленкой алюминия и нитрида алюминия (рис. 1).

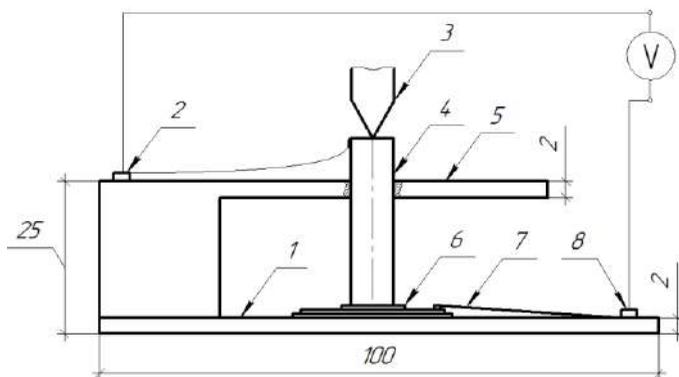


Рисунок 1. Схема измерительного узла [2]

Конструкция состоит из платы (1) с посадочным гнездом для подложки размером 20×12 мм, в которое помещается исследуемый образец (6). На плату установлена консольная балка (5) с отверстием для медного цилиндра (4), который выступает в качестве верхнего электрода и контактирует с поверхностью пленки AlN. Нижний электрод (7) выполнен в качестве прижима и контактирует с пленкой алюминия. Выводы контактов нижнего (8) и верхнего (2) электродов закреплены на плате и балке соответственно. На пленку нитрида алюминия через медный цилиндр подается фиксированная механическая нагрузка, заданная на твердомере, передающаяся через индентор (3), вследствие чего на электродах образуется разность потенциалов, которую фиксирует подключенный к выводам вольтметр [2]. Полученные значения используются для расчета пьезомодуля d_{33} , который затем пересчитывается в пьезомодуль d_{33} .

Пленки нитрида алюминия формировались методом магнетронного распыления алюминиевой мишени на постоянном

токе в атмосфере аргона и азота. Вакуумная камера предварительно откачивалась турбомолекулярным насосом до давления не более $2 \cdot 10^{-4}$ Па. Ситалловая подложка предварительно нагревалась ИК излучением до заданной температуры 390 °С. Толщина и скорость напыления пленок AlN контролировалась резонансным методом с использованием датчика на основе кварцевого резонатора с чувствительностью 0,5 нм/с.

Дальнейшее исследование характеристик пленок осуществлялось методами, основанными на явлении прямого и обратного пьезоэффекта.

Расчет пьезомодуля g_{33} производился по формуле [3]:

$$g_{33} = \frac{U}{d \cdot P}; \quad (1)$$

где U – полученное напряжение (В), d – толщина пленки (м), P – приложенное давление (Па).

Пьезомодуль d_{33} и пьезомодуль g_{33} связаны между собой через диэлектрическую постоянную [4], поэтому полученные значения пьезомодуля g_{33} можно пересчитать в d_{33} , согласно соотношению:

$$d_{33} = g_{33} \cdot \varepsilon_a; \quad (2)$$

Таблица 1. Сравнение результатов

Образец	Толщина, мкм	Давление в камере, Па	Методика	<d33>, пм/В	Δd33, пм/В
№ 152	1	0,07	СМП	1,934	0,224
№ 167		0,1	СМП	2,054	0,192
№ 167			Разработанная	1,405	0,338

где g_{33} – пьезоэлектрическая постоянная давления (В·м/Н), ε_a – диэлектрическая постоянная $\{\varepsilon_a = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon = 8,85 \cdot 8,5 \cdot 10^{-12} [\text{Ф/м}]\}$.

Полученные результаты расчета были усреднены и сведены в таблицу 1 для оценки полученных результатов.

Для оценки эффективности методики полученный образец AlN №167 предварительно исследовался методом сканирующей силовой микроскопией пьезоотклика (ССМП), с целью сравнения полученных результатов [5].

Исходя из полученных результатов, можно наблюдать близкие по значению показатели пьезомодуля для обоих методов измерения (2,054 пм/В для метода ССМП и 1,405 пм/В для метода на основе прямого пьезоэффекта). Таким образом оба метода могут быть использованы для оценки качества получаемых пленок.

Работа выполнена по государственному заданию Омского научного центра СО РАН (номер госрегистрации проекта 121121700062-3).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Танская Т. Н., Зима В. Н., Козлов А. Г.* Сравнительный анализ технологии изготовления и характеристик тонкопленочных СВЧ резонаторов на ОАВ // Обмен опытом в области создания сверхширокополосных радиоэлектронных систем: материалы VI Общерос. науч.-техн. конф. / ОмГТУ. Омск, 2016. С. 355–367.
- [2] *Струнин В. И., [и др.]*. Определение пьезомодуля (d33) тонких пленок нитрида алюминия методом измерения прямого и обратного пьезоэффекта. Радиофизика, фотоника и исследование свойств вещества [Электронный ресурс]: тезисы докладов II Российской научной конференции (Омск, 5–7 октября 2022 года). – Электрон. текст. дан. – Омск: ОНИИП, 2022. – 204–206 с.
- [3] *Инженерные решения.* [Электронный ресурс] URL: <https://engineering-solutions.ru/ultrasound/piezomaterials>
- [4] *Пьезокерамические материалы НКТБ "Пьезоприбор".* [Электронный ресурс] URL: <https://ivtipt.ru/pm>
- [5] *Давлеткильдеев Н. А., Мосур Е. Ю., Никифорова А. О.* Изучение пьезоэлектрических свойств ниобата лития методом сканирующей силовой микроскопии пьезоотклика // Техника радиосвязи. 2022. Выпуск 4 (55). С. 83–90.

Куклев Александр Юрьевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, Физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, alexanderkuklev@mail.ru.

Исследование содержания основных компонентов в молоке высокочастотным импедансным методом

А. Р. Сайтбагина

Научный руководитель: д.т.н., проф. А. Г. Козлов

Аннотация. В статье представлены основы метода исследования молока с помощью векторного анализатора цепей NanoNVA. Показана возможность определения массовой доли жира в составе молока на примере образцов различного производства. Представлены результаты сравнения модуля импеданса для молока с различной жирностью.

Ключевые слова: молоко, импеданс, NanoNVA, массовая доля жира.

Коровье молоко – один из наиболее ценных пищевых продуктов животного и растительного происхождения, потребляемый человеком. В натуральном виде молоко обладает высокой питательностью, так как является хорошим источником качественных жиров, белков, лактозы, минералов и различных витаминов. Качество молока регламентируется государственным стандартом [1]. В связи с этим анализ компонентного состава играет первостепенную роль для производителей и потребителей продукции.

Молоко представляет собой гетерогенную структуру, имеющую сложный химический состав. В нем насчитывается более ста различных компонентов, количество которых не является строго постоянным. Отклонения в составе молока объясняются влиянием множества факторов: генетика, рацион кормления, стадии лактации, частота доения, возраст, состояние здоровья, погода, климат и география, наличие мест для выпаса и отдыха и пр. В среднем молоко имеет следующий состав: вода 85-89% и сухой остаток 11-15% [2].

Исследование компонентного состава молока методом импедансной спектроскопии основано на пропускании переменного электрического тока разных частот через пробу и измерении истинного сопротивления коллоидного вещества. Для анализа спектров различных образцов молока, характеристики которых представлены в таблице 1, был проведен ряд

экспериментов на векторном анализаторе цепей NanoNVA, предназначенном для измерения амплитудно-частотных характеристик и коэффициентов стоячей волны. Сам образец молока помещался в электрохимическую ячейку объемом 0,078 мл с планарными встречно-штыревыми электродами и регулируемой высотой микроканала.

Таблица 1. Характеристика исследуемого молока (на 100 г)

№	Изготовитель	Массовая доля жира, г	Белок, г	Угле-воды, г	Энергетическая ценность, ккал/кДж
1	АО «Данон Россия»	2,5	3,0	4,7	53/223
2	АО «Любинский молочно-консервный комбинат»	3,2	3,0	4,7	60/250
3	АО «ВБД»	4,0	3,1	4,7	66/262

Но, так как в сверхвысокочастотном диапазоне (СВЧ) измерение тока и напряжения затруднительно ввиду значительных погрешностей, импеданс рассчитывается посредством измерения возвратных потерь [3]:

$$Z = \frac{Z_0(1 + S_{11})}{1 - S_{11}},$$

где Z – рассчитываемый импеданс S_{11} – параметр рассеяния, $Z_0 = 50$ Ом – входное сопротивление подсоединяемого кабеля.

В результате исследований были получены различные спектры:

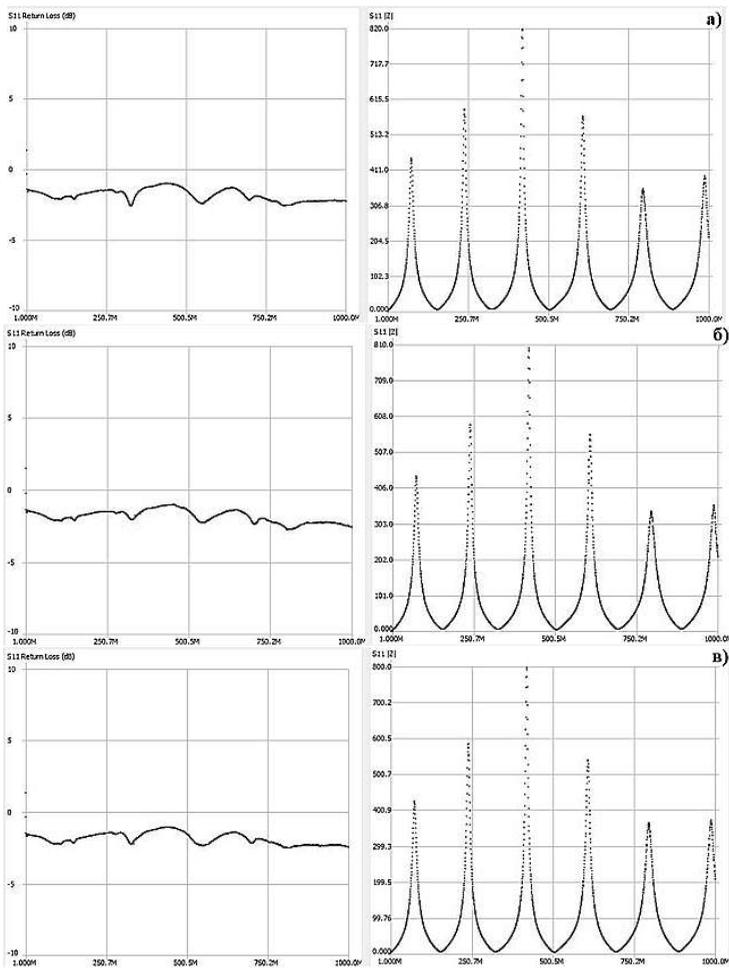


Рисунок 1. Возвратные потери и модули импеданса для образцов №1 (а), №2 (б) и №3 (в) в диапазоне частот 100-1000 МГц.

При увеличении содержания массовой доли жира в образцах наблюдается смещение минимума потерь, спектры при этом становятся более сглаженными и размытыми, а на частоте 315 МГц уменьшаются с 2.5 dB до 2.1 dB. Вероятно, минимум потерь на данной частоте соответствует содержанию жира в молоке.

При анализе спектров модуля импеданса наблюдается его уменьшение примерно на 10 Ом на низких частотах, а на более высоких частотах значения меняются – это может быть связано с содержанием каких-то характерных элементов молока, например, водой. Сравнительные результаты представлены в таблице 2.

Таблица 2. Результаты сравнения модуля импеданса

№	Частота, МГц					
	70	234	395	615	790	960
Модуль импеданса, Ом						
1	448	605	820	564	359	384
2	443	597	810	558	325	355
3	425	590	800	550	350	370

В результате исследования было установлено, что высокочастотный импедансный метод анализа с помощью прибора NanoNVA позволяет определять массовую долю жира молока. Для более точного определения содержания компонентного состава необходимо проводить различные лабораторные исследования на более широкой выборке материалов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] ГОСТ Р 52054-2003. Молоко натуральное коровье - сырье. Технические условия: государственный стандарт Российской Федерации: дата введения 2004-01-01. Москва: Стандартинформ, 2008. 30 с.
- [2] *Walstra P., Geurts T.J., Noomen A., Jellema A., van Boekel M.A.J.S.* Dairy technology: principles of milk properties and processes // New York: Marcel Dekker, Inc., 1999. P. 189.
- [3] *Walker B.* Using a VNA for Power Plane Impedance Analysis // Signal Integrity Journal, 2019. PP. 1-9.

Сайтбагина Анастасия Руслановна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ФФ,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644492,
anasvlknsk@gmail.com

Исследование взаимодействия лазерного излучения с титанатом стронция

А. А. Воронина

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Г. М. Серопян

Аннотация: В работе исследовалось разрушение титаната стронция при облучении наносекундным лазером. Проведены расчёты компонент тензора напряжений при разных значениях радиуса лазерного пятна. На основе исследований получена зависимость радиуса области разрушений от интенсивности лазерного излучения.

Ключевые слова: титанат стронция, импульсное лазерное излучение, лазерное разрушение, упругие напряжения.

В прозрачных диэлектриках основными считают следующие механизмы лазерного разрушения: тепловые, фоновые, связанные с влиянием несовершенств кристаллической решетки, связанные с неоднородностью лазерного поля, влияние электронной лавины и многофотонного поглощения света. В данной работе исследовалось лазерное разрушение монокристаллического титаната стронция наносекундным лазерным излучением. Применялся твердотельный YAG лазер с длиной волны излучения 1064 нм и длительностью импульса 16 нс.

Для расчёта компонент тензора и на малых расстояниях от центра пучка при его сильной фокусировке можно воспользоваться формулами из работы [1]:

$$\sigma_{rr}(r, 0, \omega) \cong -\frac{\alpha_{th} E W_L}{32\sqrt{\pi} K_S} \frac{1}{a} \left(1 - \frac{1}{1-\nu} \frac{r^2}{2a^2} \right),$$
$$\sigma_{\theta\theta}(r, 0, \omega) \cong -\frac{\alpha_{th} E W_L}{32\sqrt{\pi} K_S} \frac{1}{a} \left(1 - \frac{1}{1-\nu} \frac{3r^2}{2a^2} \right),$$

где $\alpha_{th} = 9,4 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ – коэффициент теплового расширения титаната стронция, $K_S = 12 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ (при 300 К) – коэффициент теплопроводности, $E = 3,03 \cdot 10^{11} \text{ Па}$ – модуль Юнга, $\nu = 0,276$ – коэффициент Пуассона. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона

взяты из работы [2].

Были проведены расчёты зависимости компонент тензора напряжений σ_{rr} и $\sigma_{\theta\theta}$ от расстояния r от центра пучка для титаната стронция при разных значениях радиуса лазерного пятна a . Зависимости представлены на рис. 1 и 2 соответственно. Импульсная мощность лазерного излучения $W_L = 83$ кВт, радиус лазерного пучка a на поверхности образца составлял 25, 50, 150 и 200 мкм.

Экспериментальные исследования показали, что при интенсивностях выше порога разрушения уже после первого импульса титанат стронция разрушается с образованием сетки микродефектов. Это позволяет энергии последующих импульсов эффективнее преобразовываться в тепловую энергию кристалла на этих дефектах. Характерная микрофотография одноимпульсного разрушения титаната стронция SrTiO_3 при $a = 25$ мкм представлена на рис. 3 [3].

На рис. 4 показаны области дефектов для одноимпульсного разрушения титаната стронция, где r_0 – расстояние, на котором заметны микротрещины. Микротрещины пропадают за пределами области r_0 . Из графика зависимости σ_{rr} от расстояния r следует, что r достигает значения r_0 при $\sigma_{rr} = 0$.

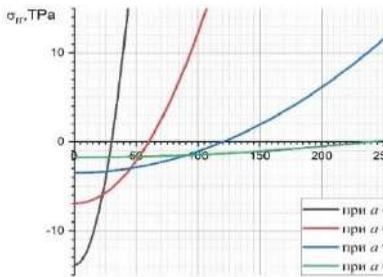


Рисунок 1. Зависимость радиальной компоненты тензора напряжения от расстояния r от центра пучка при разных значениях радиуса лазерного пятна a .

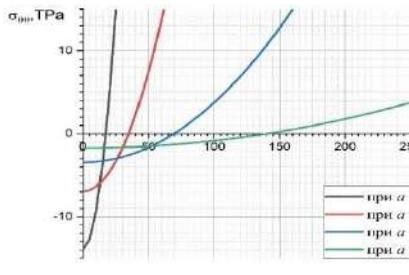


Рисунок 2. Зависимость тангенциальной компоненты тензора напряжения от расстояния r от центра пучка при разных значениях радиуса лазерного пятна a .

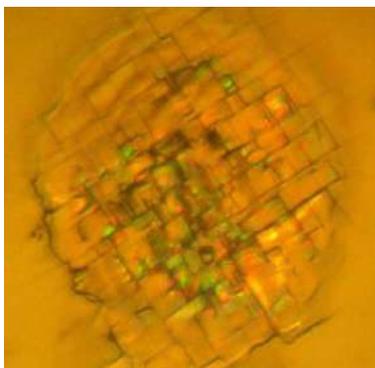


Рисунок 3. Характерная микрофотография разрушения титаната стронция [3].

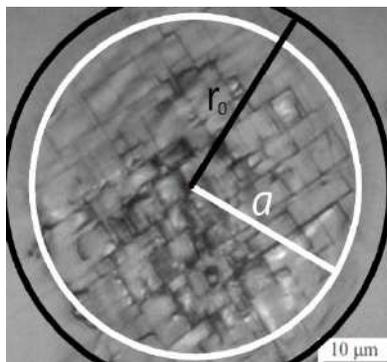


Рисунок 4. Область разрушений титаната стронция.

На рис. 5 представлена зависимость радиуса области видимых разрушений r от интенсивности лазерного излучения. Происходит резкое увеличение радиуса разрушений при низких интенсивностях, а при высоких интенсивностях наблюдается незначительный рост области разрушений.

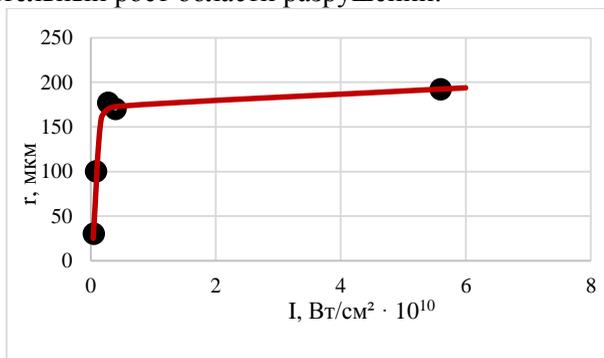


Рисунок 5. Зависимость радиуса области разрушений r от интенсивности лазерного излучения I .

В результате исследований проведены расчёты зависимости компонент тензора напряжения от расстояния от центра пучка для титаната стронция при разных значениях радиуса лазерного пятна. Микроскопические исследования

разрушений позволяют сделать вывод, что радиальные напряжения отвечают за видимую область микротрещин. Микротрещины исчезают, когда радиальное напряжение становится равным нулю. На основе экспериментальных исследований построена зависимость радиуса области разрушений от интенсивности лазерного излучения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Муратиков К.Л.* Об оценке упругих напряжений в приповерхностных слоях твердотельных объектов, создаваемых термоупругими деформациями при поглощении нестационарного лазерного излучения // Журнал технической физики. 2013. Том 83. Вып. 12. С. 155-158.
- [2] *Шановалов В.А.* Спин-волновой резонанс и его поверхностная мода в пленке манганита // Физика и техника высоких давлений. 2010. Том 20. № 1. С. 56-61
- [3] *Позыгун И.С., Серопян Г.М., Султанов И.Р., Сычев С.А., Теплоухов А.А.* Взаимодействие наносекундного лазерного излучения с поверхностью монокристаллического титаната стронция // Журнал технической физики. 2017. том 87. вып. 8. С. 1261-1263.

Воронина Анастасия Александровна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А,
a-voronina132000@mail.ru

ARMA-оптические фильтры с максимально плоскими передаточными функциями

А. С. Калита

Научный руководитель: к. ф.-н., доцент Т. К. Болецкая

Аннотация. В работе приведен алгоритм расчета характеристик ARMA оптических фильтров, состоящих из каскада интерферометров Маха-Цендера, связанных с кольцевыми волноводами. Выполнены расчеты передаточных функций.

Ключевые слова: оптические ARMA-фильтры, интерферометр Маха-Цендера, кольцевой волновод.

Одним из основных направлений научно-технического прогресса является всестороннее развитие волоконно-оптических систем связи. Для осуществления волоконно-оптической связи требуются устройства для обработки оптических сигналов, в частности фильтры.

Оптические фильтры состоят из нескольких звеньев. После прохождения каждого звена фаза оптического сигнала изменяется на одну и ту же величину. Поэтому передаточная функция фильтра записывается в виде дроби, в числителе и знаменателе которой стоят полиномы от $z^{-1} = e^{-j\omega'}$, ω' – нормированная безразмерная частота. Таким образом, передаточная функция имеет такой же вид, как для цифровых фильтров [1]. Поэтому среди оптических фильтров можно выделить MA-фильтры скользящего среднего, AR авторегрессионные фильтры и авторегрессионные фильтры скользящего среднего.

Настоящая работа посвящена исследованию устройства и методов расчета ARMA оптических фильтров с максимально плоской импульсной характеристикой. Такие фильтры могут состоять из каскада интерферометров Маха-Цендера, связанных с кольцевыми волноводами, как показано на рис. 1.

Передаточные функции bar- и cross-портов определяются так:

$$H_{\text{bar}}(z) = \frac{H_N(z)}{G_N(z)}; \quad H_{\text{cross}}(z) = \frac{jF_N(z)}{G_N(z)}, \quad (1)$$

где $H_N(z)$, $F_N(z)$ и $G_N(z)$ – полиномы степени N , равной числу ступеней.

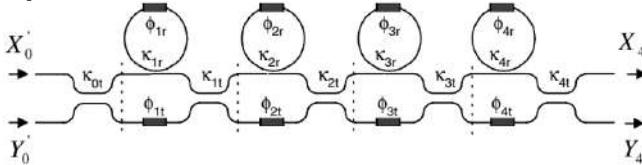


Рисунок 1. Схема многоступенчатого ARMA-фильтра.

Проектирование оптических ARMA-фильтров заключается в определении коэффициентов полиномов $H_N(z)$, $F_N(z)$ и $G_N(z)$; коэффициентов связи κ_{nr} , $n=0,1,\dots,N$; κ_{nr} , $n=1,2,\dots,N$; и фазовых сдвигов, вносимых в сигнал ϕ_{nr} , $n=1,2,\dots,N$; ϕ_{nr} , $n=1,2,\dots,N$. Алгоритм проектирования приведен в таблице.

Таблица 1. Алгоритм проектирования оптических ARMA-фильтров.

1.	Определение коэффициентов полиномов $H_N(z)$ и $G_N(z)$.
2.	Вычисление коэффициентов связи κ_{nr} и фазовых сдвигов ϕ_{nr} : $\kappa_{nr} = 1 - \rho_n ^2, \quad \phi_{nr} = -\arg \rho_n,$ ρ_n – корни полинома $G_N(z)$, $n=1,2,\dots,N$.
3.	Вычисление коэффициентов полинома $F_N(z)$: а) вычисление корней α_k полинома $G_N(z)G_N^*((z^*)^{-1}) - H_N(z)H_N^*((z^*)^{-1})$ б) вычисление модуля первого коэффициента $ a_0 = \sqrt{\frac{G_N(1)G_N^*(1) - H_N(1)H_N^*(1)}{\prod_{k=1}^N (1 - \alpha_k)(1 - \alpha_k^*)}};$

	<p>с) вычисление аргумента первого коэффициента</p> $\arg a_0 = \arg \left\{ -\frac{F_N(\rho_N)}{H_N(\rho_N)} \right\} = \arg \left\{ -\frac{\prod_{k=1}^N (\rho_N - \alpha_k)}{H_N(\rho_N)} \right\}.$
4.	<p>а) вычисление $H_n(z)$ и $F_n(z)$ по рекуррентным формулам;</p> <p>б) вычисление коэффициентов связи κ_{nt} и фазовых сдвигов ϕ_{nt}:</p> $\kappa_{nt} = \frac{F_n^2(\rho_n)}{F_n^2(\rho_n) + H_n^2(\rho_n)};$ $\phi_{nt} = \phi_{nr} - \arg \left\{ -\frac{(\rho_{n-1}^{-1} - \rho_n^*)(s_{nt} H_n(\rho_{n-1}) + c_{nt} F_n(\rho_{n-1}))}{(1 - \rho_n \rho_{n-1}^{-1})(-c_{nt} H_n(\rho_{n-1}) + s_{nt} F_n(\rho_{n-1}))} \right\}$

Написана программа, реализующая описанный алгоритм. Выполнены расчеты для фильтра со следующими спецификациями: частота среза $\omega_c = 0,1\pi$, уровень пульсаций в полосе пропускания $\delta_1 = -1$ дБ, уровню пульсаций в полосе заграждения $\delta_2 = -30$ дБ. $H_N(z)$ и $G_N(z)$ определялись по аналоговому эллиптическому прототипу 4-го порядка.

На рис. 2 приведена схема рассчитанного фильтра. Так как $\kappa_{1t} = \kappa_{3t} = 1$, а $\kappa_{2t} = 0$, фильтр состоит только из одного интерферометра Маха-Цендера. ϕ_t – сумма всех фазовых сдвигов ϕ_{nt} . На рис. 3 приведены графики зависимостей квадратов модулей передаточных функций от нормированной частоты. Передаточные функции максимально плоские в полосах пропускания. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами, приведенными в литературе.

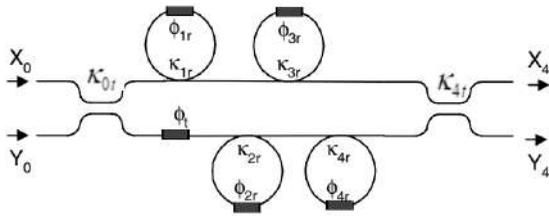


Рисунок 2. Схема рассчитанного фильтра.

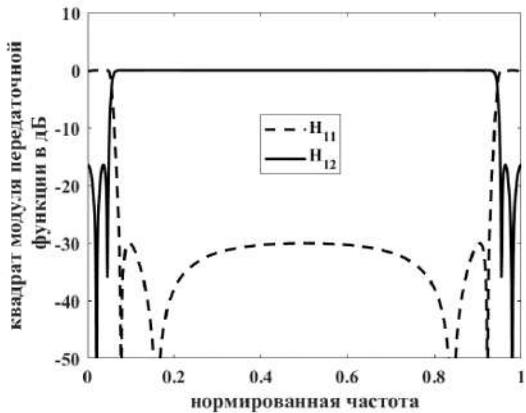


Рисунок 3. Зависимости передаточных функций рассчитанного фильтра от нормированной частоты.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Christi K. Madsen, Jianh. Zhao.* Optical Filter Design and Analysis. A Signal Processing Approach. New York.: JOHN WILEY & SONS, INC., 1999.

Калита Александр Сергеевич,
 Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
 2 курс магистратуры, физический факультет,
 644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238, kalita-1997@bk.ru

Исследование зависимости критической температуры перехода сверхпроводящего купрата $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ при замещении свинцом бария

Е. Е. Нисневич

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент С. А. Сычёв

Аннотация: Проведены исследования по влиянию на критическую температуру и ширину перехода в высокотемпературном сверхпроводнике YBCO при частичном замещении бария свинцом. Получены интересные результаты, позволяющие утверждать, что сверхпроводимость сохраняется на достаточно высоких значениях критической температуры при 50% замещении бария свинцом при условии наклороживания образцов после синтеза. Показано, что добавки свинца позволяют синтезировать более сложные фазы по катионному составу.

Ключевые слова: критическая температура и ширина перехода, высокотемпературная сверхпроводимость, кислородная и катионная стехиометрия, структурные фазовые переходы.

После открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) Беднорцом и Мюллером [1], были проведены многочисленные исследования их свойств. Многие работы были посвящены свойствам катионов меди, входящих в структуру сверхпроводников [2]. До настоящего момента высокотемпературные сверхпроводники на основе меди обладают наивысшей температурой перехода в СП состояние при атмосферном давлении (ртутные ВТСП, $T_c = 136$ К). Известно, что сверхпроводимость реализуется в нестехиометрических по кислороду оксидных соединениях. При этом нестехиометричность в соединении связывалась с атомами меди Cu^{3+} в структуре. Такие выводы подтверждались экспериментами по йодометрическому титрованию меди [3]. Литературный обзор по этой теме навел на мысль, что возможно получение новых сверхпроводящих соединений с необычными свойствами, если в качестве допирующих или замещающих элементов использовать элементы, которые легко меняют степень окисления в оксидных

сверхпроводниках при изменении условий синтеза. К таким легко меняющим степень окисления элементам, в частности, относятся свинец, хром, марганец и др. [4,5]. При этом замещать, например, свинцом можно в принципе любой элемент в высокотемпературных сверхпроводниках с целью получения новых сверхпроводящих фаз. Такие эксперименты позволяют лучше понять природу высокотемпературной сверхпроводимости.

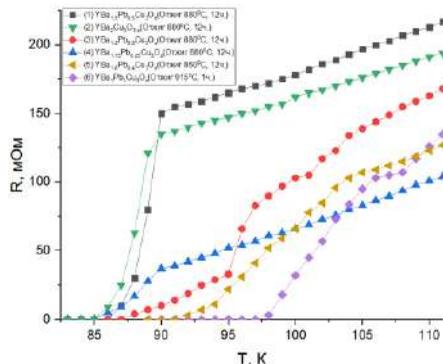
Методика проведения экспериментов.

1. Записывается уравнение реакции по которому синтезируют соединение.
2. Определяют соотношения реагентов, участвующих в реакции.
3. Смешивают исходные реагенты, помещают в тигель в муфельной печи, где производят программируемый нагрев до заданной температуры до полного взаимодействия реагентов.
4. Извлекают спек из тигля, размалывают, прессуют в изделие (диск, цилиндр, параллелепипед и др.).
5. Снова помещают в печь на подложку из корунда или платины и обжигают до приобретения изделием требуемых свойств или размеров. Когда температура спекания неизвестна, производят много ступенчатых отжигов при разных температурах. На каждом этапе производят контроль критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние четырехзондовым методом и определяют оптимальные условия синтеза для данного соединения. Это необходимо делать, поскольку реагенты, входящие в структуру сверхпроводника, обладают разными температурами плавления и реакционной способностью.

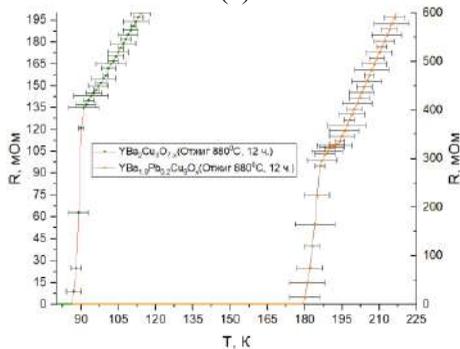
Таким образом, процессы допирования и замещения элементов в ВТСП представляют собой трудоемкую многопараметрическую задачу.

Результаты экспериментов по замещению бария свинцом в $YBa_2Cu_3O_{7-x}$.

На рисунке 1 представлены основные результаты, полученные при замещении бария свинцом в сверхпроводящем купрате $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, при ступенчатых режимах отжига.



(а)



(б)

Рисунок 1. Графики сверхпроводящих переходов иттриевого купрата при частичном замещении бария свинцом (а). Сверхпроводящий переход иттриевого купрата при замещении бария свинцом и увеличении концентрации меди (б) до формулы $\text{YBa}_{1,8}\text{Pb}_{0,2}\text{Cu}_9\text{O}_x$. Слева сверхпроводящий переход $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ приведен для сравнения. Во всех образцах наблюдалась сверхпроводимость, что дополнительно подтверждалось эффектом Мейснера-Оксенфельда (левитация).

Измерения критической температуры указанных соединений по левитирующему магниту, дали значения примерно на 7 К выше, чем указанные на рисунке 1(а). На рисунке 1(б) приведен график сверхпроводящего перехода иттриевого купрата, соответствующего формуле $\text{YBa}_{1,8}\text{Pb}_{0,2}\text{Cu}_9\text{O}_x$. Формула соответствует мольным долям реагентов, участвующим в реакциях синтеза. Соединение не

является стабильным и уменьшает температуру перехода при повторных измерениях критической температуры. Соединение было получено несколько раз при ступенчатых режимах отжига, причем критическая температура лежала в диапазоне от 170 до 185 К при первом измерении. Дальнейшее снижение температуры при каждом измерении уменьшало ее значение примерно на 20К.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Беднорц И.Г., Мюллер К.А.* Успехи физических наук. 1988, т.156, №2, с.323-346.
- [2] *Saito Y. e.a.* Jap. J. Appl. Phys., Part 2, 1987, v.26, N 5, p. L838.
- [3] *Harris D.C., Hewston J.* Solid State Chem., 1987, v.69, №1, p.182.
- [4] *Xia Jiansheng, Cao Liezhao, Fang Minghu, Zhang Qirui, Zhang Han, Qian Yitai.* Electronic Properties of Superconducting Pb-doped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ system. Solid State Communications, Vol.68, № 7, pp. 643-645, 1988. Printed in Great Britain.
- [5] *Peng-Tao Yang, Qing-Xin Dong e.a.* Superconductivity on the Border of Antiferromagnetic Order in RbMn_6Bi_5 under High Pressure: A New Family of Mn-based Superconductors // Chinese Phys. Lett., 39067401. DOI 10.1088/0256-307X/39/6/067401.

Нисневич Егор Евгеньевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238, tost_00@mail.ru

Исследование влияния интенсивности лазерного излучения на морфологию поверхности напыляемой $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ плёнки

Д. С. Сидоренко

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Г. М. Серопян

Аннотация: Исследовалась поверхность тонких плёнок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, напылённых методом лазерной абляции. Сравнивались образцы, полученные при различных плотностях мощности излучения. Построены распределения кластеров по размеру и предложено два способа их аппроксимации.

Ключевые слова: лазерное напыление, морфология поверхности, высокотемпературная сверхпроводимость.

Введение

При облучении материала лазером происходит ряд процессов, исследование которых представляет собой достаточно обширную тему [1, 4]. Одним из наиболее важных среди них является абляция. Помимо значимости для микрообработки, это явление используется для напыления тонких плёнок, что необходимо в микроэлектронике [5].

Качество плёнок зависит от технологических условий напыления и взаимодействия лазерного излучения с веществом. Наличие жидкой фазы в эрозионном факеле ведёт к его ухудшению. В данной работе рассматриваются плёнки из высокотемпературной сверхпроводящей керамики $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. А качество поверхности такой плёнки влияет не только на её технологические свойства, но и на такие важные параметры как температура и ширина критического перехода [2, 3].

Целью данной работы является исследование влияния параметров лазерного излучения на морфологию поверхности напылённой плёнки.

Результаты исследования

Напыление плёнок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ производилось с помощью твердотельного импульсного Nd:YAG лазера с длиной волны $\lambda = 1064$ нм, длительностью импульса $\tau = 16$ нс, плотностями

мощности излучения $W = 4, 20, 64$ ГВт/см² и частотой следования импульсов $f = 10$ Гц. Давление в камере составляло 100 Па, расстояние от мишени до подложки – 2–3 см, плотность мишени – 4,5 г/см³. В качестве подложки использовался SrTiO₃ с ориентацией (100), температура при напылении – 820° С [6].

На рисунках 1–3 представлены диаграммы распределения кластеров по диаметру для различных плотностей мощности излучения, а также построены сглаживающие линии. Аппроксимирующая функция выбрана в следующем виде:

$$f(x) = A e^{-\frac{x}{b}} \left(1 + k \sin \frac{\pi x}{l}\right), \quad (1)$$

здесь A, b, k и l – определённые константы (Табл. 1).

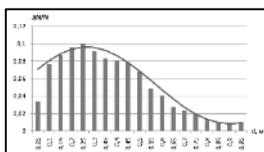


Рисунок 1.
Распределение кластеров для плотности мощности 4 ГВт/см² со сглаживающей линией в виде (1).

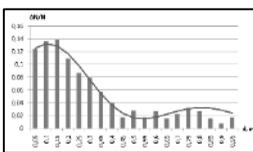


Рисунок 2.
Распределение кластеров для плотности мощности 20 ГВт/см² со сглаживающей линией в виде (1).

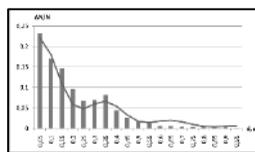


Рисунок 3.
Распределение кластеров для плотности мощности 64 ГВт/см² со сглаживающей линией в виде (1).

С ростом плотности мощности уменьшается средний размер частиц: для плотности мощности 4 ГВт/см² он составил 0,36 мкм, для 20 ГВт/см² – 0,28 мкм, а для 64 ГВт/см² – 0,22 мкм. Вместе с тем происходит увеличение параметра сглаживающей функции A и уменьшение параметров b, k и l .

Таблица 1. Значения параметров аппроксимирующей функции (1).

Плотность мощности, ГВт/см ²	4	20	64
A	0,06	0,11	0,2
b , мкм	2,5	0,5	0,25
k	0,8	0,6	0,4
l , мкм	0,6	0,35	0,15

Помимо предложенного выше приближения можно представить распределения кластеров в виде суммы гауссовых распределений с различными центральными значениями (рисунки 4–6). Формулы для них выглядят следующим образом:

$$f_1(x) = 0,08e^{-10(x-0,25)^2} + 0,02e^{-2(x-0,45)^2},$$

$$f_2(x) = 0,13e^{-25(x-0,15)^2} + 0,02e^{-15(x-0,55)^2} + 0,02e^{-40(x-0,75)^2},$$

$$f_3(x) = 0,25e^{-30x^2} + 0,08e^{-100(x-0,35)^2} + 0,005e^{-5(x-0,8)^2}, \quad (2)$$

здесь f_1 , f_2 и f_3 – аппроксимирующие функции для плотностей мощности излучения 4, 20 и 64 ГВт/см² соответственно. Значения x подставляются в микрометрах.

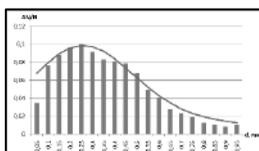


Рисунок 4.
Распределение кластеров для плотности мощности 4 ГВт/см² со сглаживающей линией в виде (2).

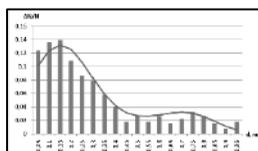


Рисунок 5.
Распределение кластеров для плотности мощности 20 ГВт/см² со сглаживающей линией в виде (2).

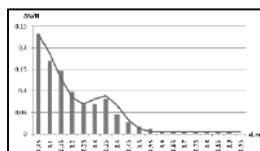


Рисунок 6.
Распределение кластеров для плотности мощности 64 ГВт/см² со сглаживающей линией в виде (2).

Каждое из слагаемых в выражениях (2) представляет собой распределение частиц, образованных определённым образом. Предположительно, кластеры меньшего размера формируются за счёт конденсации вблизи подложки, среднего – конденсации в центральной части пароплазменного облака, а крупные – в результате отрыва от мишени.

Заключение

Таким образом, с ростом плотности мощности излучения происходит увеличение доли мелких и уменьшение доли крупных кластеров. Это, по нашему мнению, связано с изменением вклада каждого из способов их формирования.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Вейко В. П., Петров А. А.* Опорный конспект лекций по курсу «Лазерные технологии» // СПб.: СПбГУ ИТМО. 2009. 143 с.
- [2] *Ильин А. И., Трофимов О. В., Иванов А. А.* Связь морфологии поверхности тонких плёнок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, полученных импульсным лазерным напылением, с температурой окончания сверхпроводящего перехода // Физика твёрдого тела, 2020. Т. 62. – № 9 (91347). С. 1555 – 1561.
- [3] *Красносвободцев С. И., Маресов А. Г., Образцов А. Н., Пирогов В. Г., Снигирев О. В.* Влияние параметров YBCO плёнок на свойства ВТСП ПТ сквидов // Журнал технической физики, 1995. Т. 65. № 2. С. 87 – 94.
- [4] *Парфенов В. А.* Лазерная микрообработка материалов: Учеб. пособие // СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2011. 59 с.
- [5] *Предтеченский М. Р.* Метод лазерного напыления в синтезе ВТСП автореф. дис. // Рос. академия наук. Сиб. отд-ние. Ин-т теплофизики. Новосибирск, 1993.
- [6] *Позыгун И. С., Серопян Г. М., Сычёв С. А.* Выращивание YBCO пленок методом лазерной абляции: лабораторный практикум по курсу «Лазерная физика» для студентов физического факультета // Омск: Омск. гос. ун-т. 2019. 20 с.

Сидоренко Денис Сергеевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)363958,
dazxcqs@gmail.com

Влияние облучения мощным ионным пучком на окисление поликристаллического магния

Т. В. Черникова

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Т. В. Панова

Аннотация. Представлены результаты исследования воздействия мощного ионного пучка на окислительные характеристики поликристаллического магния. Обнаружено, что облучение МИП привело к улучшению коррозионных характеристик исследуемых образцов. Наибольший эффект наблюдается при воздействии МИП с плотностью тока 150 А/см^2 .

Ключевые слова: магний, облучение мощным ионным пучком, рентгенофазовый анализ, отжиг.

В последнее время магний и его сплавы привлекают все большее внимание. Небольшой вес изделий, выполненных из магниевых сплавов, является важной причиной применения их в космической, авиационной и автомобильной промышленности. Также магниевые детали очень хорошо поглощают вибрацию, а это свойство является очень важным при создании разнообразных транспортных средств. Ко всему прочему, магний и его сплавы активно применяются в медицине, так как имеют хорошую биосовместимость с живыми тканями и физиологическими средами [1]. Причина, по которой использование магния ограничено, заключается в его способности быстро окисляться в различных средах. Повысить его коррозионную стойкость возможно при модификации поверхности мощным ионным пучком (МИП). Облучение МИП сопровождается мощным тепловым (вплоть до температур плавления и кипения) и ударно-волновым воздействием [2]. Подобное воздействие может оказывать влияние на микроструктуру и свойства магния, в том числе и на коррозионную стойкость.

Целью настоящей работы является исследование воздействия мощного ионного пучка наносекундной длительности на окисление поликристаллического магния.

В качестве объектов исследования использовались образцы поликристаллического магния диаметром 10 мм и толщиной 2-3 мм. Облучение образцов проводилось на импульсном ионном ускорителе ТЕМП с плотностями ионного тока 50, 100 и 150 А/см², энергия пучка 250 кэВ, длительность импульса 60 нс. Окисление осуществлялось в среде атмосферы при температуре 100⁰С в течение 1 часа. Исследование характеристик, полученных образцов, проводилось с использованием методов рентгенофазового анализа и электронной микроскопии.

По данным рентгенофазового анализа поверхностный слой образцов содержит две фазы – гексагонального магния и его окисла. После облучения МИП при всех режимах облучения происходит уменьшение окисного слоя (рис. 1а). Расчет параметров решетки показал его неизменность после облучения МИП. Оценка величины остаточных напряжений показала их уменьшение с повышением плотности ионного тока. Это свидетельствует об отжиге дефектов кристаллического строения при повышении температуры модифицированной зоны. Размеры областей когерентного рассеяния также уменьшаются с повышением плотности тока.

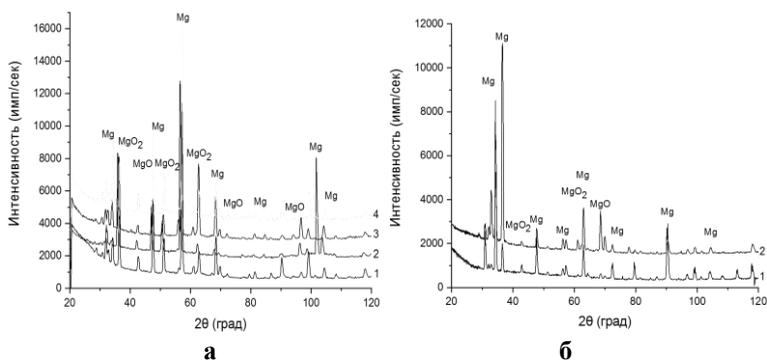
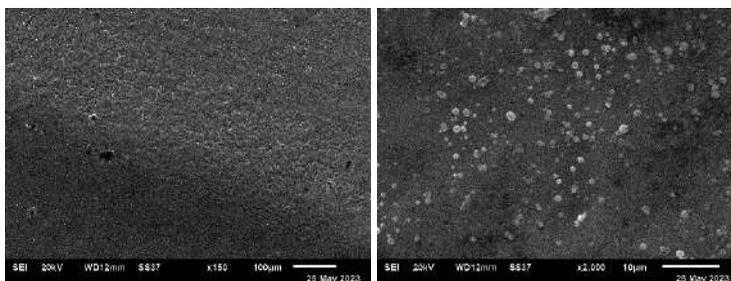


Рисунок 1. а) Дифрактограммы магния до (1) и после облучения МИП (2 – 50, 3 – 100, 4 – 150 А/см²); б) Дифрактограммы магния, выдержанного в среде атмосферы при температуре 100⁰С в течение 1 часа: до (1) и после облучения МИП с плотностью тока 150 А/см².

Анализ образцов магния выдержанных в среде атмосферы при температуре 100°C в течение 1 часа показал, что содержание окисного слоя в образце, облученном МИП с плотностью тока 150 А/см^2 , уменьшился по сравнению с необлученным магнием (рис.1 б).

Энергодисперсионный анализ показал, что для образцов, облученных МИП с плотностью тока 100 А/см^2 содержание кислорода в поверхностном слое резко уменьшается и отношение $R_{\text{Mg/O}}$ изменяется от 60 до 83. В образцах, облученных МИП с плотностью тока 150 А/см^2 на большей части поверхности кислород вообще не обнаруживается вне зоны кратеров, тогда как на краях кратеров он присутствует.



а

б

Рисунок 2. а) Переходная зона между облученным ($j = 150\text{ А/см}^2$) и необлученным участками образца магния, выдержанного в атмосфере при 100°C в течение 1 часа; б) оплавленная поверхность магния с образованием мелкодисперсных частиц, облученного МИП с плотностью тока 150 А/см^2 и выдержанного в атмосфере при 100°C в течение 1 часа.

На рис. 2а представлена переходная зона между облученным ($j=150\text{ А/см}^2$) и необлученным участками образца, выдержанного в атмосфере при 100°C в течение 1 часа. Видно, что при облучении МИП произошло оплавление поверхности с образованием мелкодисперсных частиц овальной формы (рис.2б), которые наблюдались также авторами статьи [3]. Энергодисперсионный анализ показал присутствие кислорода и магния в этих частицах. Оценка содержания кислорода в необлученной зоне и облученной МИП с плотностью тока 150

А/см² в образцах после выдержки в атмосфере кислорода показала уменьшенное в два раза отношение содержания магния к кислороду в облученном образце.

Таким образом, проведенные исследования показали, что после облучения МИП при плотностях ионного тока 50, 100 и 150 А/см² в образцах магния происходит уменьшение окисного слоя. Оценка величины остаточных напряжений показала их уменьшение с повышением плотности ионного тока, что свидетельствует об отжиге дефектов кристаллического строения при повышении температуры поверхностного слоя. Анализ образцов магния выдержанных в среде атмосферы при температуре 100°С в течение 1 часа показал, что формируемый окисный слой в образце, облученном МИП, меньше по сравнению с необлученным магнием. Это свидетельствует о коррозионной стойкости.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Волкова Е.Ф.* Современные деформируемые сплавы и композиционные материалы на основе магния (обзор) // *Металловедение и термическая обработка металлов*. 2006. №11. С. 5-9.
- [2] *Грибков В. А., Григорьев В. И., Калинин Б. А., Якушин В. Л.* Перспективные радиационно-пучковые технологии обработки материалов // М.: *Круглый год*, 2001. 528 с.
- [3] *Ковивчак В.С., Панова Т.В., Михайлов К.А.* Формирование периодических структур на поверхности магния и алюминия при воздействии мощного ионного пучка наносекундной длительности // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2012. № 1. С. 73–76.

Черникова Татьяна Викторовна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, +7 (904) 325-30-55,
tanya.hryanina@mail.ru

Исследование влияния газовой атмосферы на низкотемпературный отжиг слоев поливинилена

А. В. Касьянова

Научный руководитель: к.ф.-м.н. О. В. Кривоzubов

Аннотация. Исследованы электрофизические свойства слоев поливинилена, отожженных в интервале температур $100 \div 120$ °С в кислородной атмосфере и атмосфере водяных паров. Построены вольт-амперные характеристики и температурные зависимости, на основе которых были получены такие электрофизические параметры, как энергия активации и плотность состояний для каждого из образцов.

Ключевые слова: поливинилены, низкотемпературный отжиг, энергия активации, плотность состояний.

Полимеры с сопряженными связями широко используются во многих электронных приборах и устройствах таких, как: датчики давления, биосенсоры, солнечные элементы, теристоры, резисторы и т.д. Газовая атмосфера оказывает немалое влияние на электрофизические характеристики полимеров с системой сопряжения, поэтому изучение влияния влажности воздуха и кислорода на свойства проводящего полимера является одной из важнейших задач, определяющих его конечные свойства [1].

Целью данной работы является исследование влияния кислородной атмосферы, а также атмосферы водяных паров на электрофизические свойства слоев поливинилена в результате низкотемпературного отжига.

В данной работе пленки поливиниленов получали дегидрохлорированием поливинилхлорида под действием анилина в растворе диметилсульфоксида [2]. Синтез поливиниленов проводили с использованием ПВХ марки ПВХ-С-СИ-70, не содержащего примесей. Дегидрохлорирование осуществляли по следующей методике. В 1 % масс. раствор ПВХ в ДМСО добавляли анилин (при соотношении ПВХ: анилин 1:2) с перемешиванием в течение 48 ч. при температуре 130 °С.

В качестве подложек для изготовления планарных структур использовали покровные стекла. Подложки отмывались

в изопропиловом спирте в ультразвуковой ванне, сушились на воздухе. Слои поливинилена наносили методом spin-coating [3]. Для удаления растворителя и летучих компонент слои сушили при комнатной температуре в течение 48 часов на воздухе, а затем в сушильном шкафу при 80 °С в течение 1÷2 часов. Для измерения электрофизических параметров к слоям полимера с помощью серебряной пасты присоединяли электрические контакты. Проводящие дорожки (шириной ~1 мм) путем окрашивания наносили на расстоянии 10-15 мм друг от друга.

Приготовленные образцы помещались в трубчатую кварцевую печь и подвергались в течение 60 минут низкотемпературному отжигу при 100-120 °С. Использовали следующие режимы термообработки слоев: “сухая” атмосфера (30 %-ная влажность воздуха), кислородная атмосфера (продували сухим кислородом), и влажная атмосфера (продували воздухом 100 %-й влажности). Исследовали вольт-амперные характеристики образцов в области напряжений до 10 В и температурные зависимости сопротивления в диапазоне температур 300-380 К.

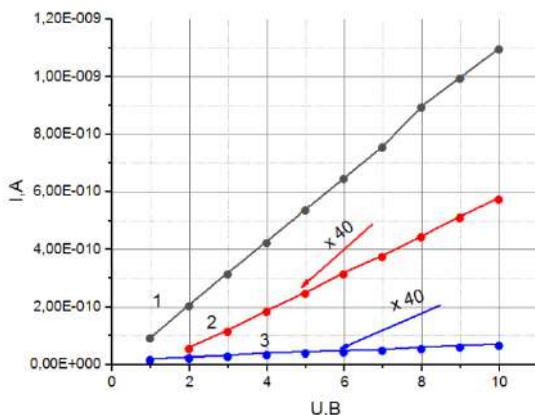


Рисунок 1. Вольт-амперная характеристика: 1 –исходный образец; 2 - отожженный в кислородной атмосфере; 3– отожженный во влажной атмосфере.

На рис.1 представлены вольт-амперные характеристики (ВАХ) сформированных структур. В исследованном нами

диапазоне напряжений от 1 до 10 В, вольт-амперные характеристики образцов являются линейными. Исходя из графиков, видно, что наибольшие значения сопротивления $\sim 10^{12}$ Ом соответствуют структуре, отожженной во влажной атмосфере. При этом наименьшими значениями сопротивления $\sim 10^9$ Ом, обладает образец, отожженный при 30 %-ой влажности атмосферы.

Температурная зависимость сопротивления исследованных образцов, представленная на рисунке 2, носит активационный характер.

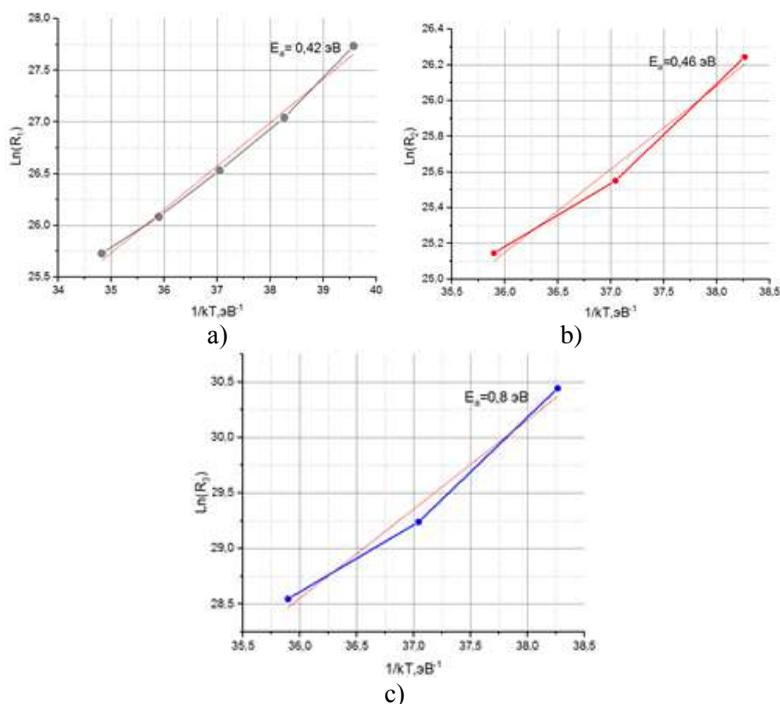


Рисунок 2. Температурная зависимость сопротивления пленок поливинилена: а) исходный образец; б) отожженный в кислородной атмосфере; в) отожженный во влажной атмосфере.

Исходя из приведенных зависимостей, определили энергию активации (E_a) структур по формуле:

$$E_a = \frac{\ln R_2 - \ln R_1}{\frac{1}{kT_2} - \frac{1}{kT_1}} \quad (1)$$

Полученные значения E_a отображены в таблице 1.

Таблица 1. Энергия активации

условия отжига	энергия активации E_a , эВ
в кислородной атмосфере	0,46
при влажности 30 %	0,42
при влажности 100 %	0,80

Численно энергия активации для исходного образца и образца, отожженного в кислородной атмосфере составляет ~ 0.4 эВ, что в два раза меньше результата, полученного для образца, отожженного при 100 %-ной влажности. В модели прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка определили плотность состояний g_m вблизи уровня Ферми по формуле Мотта [4]:

$$R = R_0 e^{\left(\frac{T_M}{T}\right)^{\frac{1}{4}}}, \text{ где } T_M \approx (g_m \alpha^3)^{-1} \quad (2)$$

Предполагая, что радиус локализации $\alpha \approx 10 \text{ \AA}$, получили значения плотности состояний, представленные в таблице 2.

Таблица 2. Плотность состояний

условия отжига	плотность состояний g_m , $(\text{эВ} \cdot \text{см}^3)^{-1}$
в кислородной атмосфере	$7,4 \cdot 10^{18}$
при влажности 30%	$1,9 \cdot 10^{16}$
при влажности 100%	$2,2 \cdot 10^{18}$

Исследование электрофизических свойств слоев поливинилена на стеклянной подложке, отожженных в интервале температур $100 \div 120 \text{ }^\circ\text{C}$ в кислородной атмосфере и атмосфере водяных паров показало, что температурная зависимость сопротивления как исходных слоев поливинилена, так и прошедших отжиг в газовой атмосфере носит активационный характер. Энергия активации электропроводности исследованных слоев имеет значение 0,42 эВ для слоев, полученных на воздухе, а также 0,46 и 0,8 для слоев, отожженных в кислородной и влажной атмосфере. Оценка плотности

состояний прыжковой проводимости показала, что большую плотность состояний имеет поливинилен, отожженный в кислородной атмосфере $7,4 \cdot 10^{18} \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}$ и влажной атмосфере $2,2 \cdot 10^{18} \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}$ в сравнении с величиной $1,9 \cdot 10^{16} \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}$.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Кряжев Д.В.* Экологические основы диагностики процессов биодеструкции природных и синтетических полимерных материалов в условиях воздействия ряда абиотических факторов внешней среды // Нижний Новгород: НГУ. 2014. 305 с.
- [2] *Кривоzubов О.В., Кряжев Ю.Г., Аникеева И.В., Давлеткильдеев Н.А., Соколов Д.В., Семенова О.Н.* Формирование на кварцевой подложке и исследование свойств наноструктурированных слоев из поливинилена, получаемого дегидрохлорированием поливинилхлорида в присутствии модифицирующей добавки – нитрата железа // Омский научный вестник. 2018. № 6 (168). С. 83–88
- [3] *Kion Norrman, Afshin Ghanbari-Siahkali.* Spin Coating polymer // Annual Reports 101, 2005. Pp.174-201
- [4] *Гантмахер В.Ф.* Электроны в неупорядоченных средах // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. 288 с.

Касьянова Анастасия Владимировна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А;
сотрудник АО «ОНИИП»,
644071, Омск-71, ул. Масленикова 231,
anastasia17032000@mail.ru

Векторная силовая микроскопия пьезоотклика индивидуальных фибрилл коллагена I типа

А. А. Александров

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Н. А. Давлеткильдеев

Аннотация. В статье рассматривается проблема экспериментального определения эффективного пьезоэлектрического коэффициента индивидуальных фибрилл коллагена I типа. Приводятся результаты векторной силовой микроскопии пьезоотклика индивидуальных фибрилл коллагена I типа.

Ключевые слова: коллаген I типа, индивидуальные фибриллы коллагена, векторная силовая микроскопия пьезоотклика, пьезоэлектрический коэффициент.

Пьезоэлектричество – это обратимая электромеханическая связь электрической поляризации и механической деформации, проявляющаяся в диэлектриках. Эта связь проявляется как появление электрической поляризации под действием механического напряжения (прямой пьезоэффект), и как возникновение механической деформации под действием электрического поля (обратный пьезоэффект). В 1957 г., когда было обнаружено пьезоэлектричество кости, было высказано предположение о связи пьезоэлектричества кости и адаптации кости к механическим нагрузкам, т.е. о связи пьезоэффекта в кости и закона Вольфа [1]. Закон Вольфа – эмпирическое правило, согласно которому кость адаптируется к механическим нагрузкам. После обнаружения пьезоэлектричества коллагена в 1964 году, было высказано предположение о том, что именно коллаген I типа обеспечивает пьезоэлектричество в кости [2].

Фибриллы коллагена обладают характерной периодичностью – D-периодом, который для коллагена I типа составляет ~ 67 нм [3].

Многие заболевания соединительной ткани (коллагенозы, дисплазии) связаны с нарушениями структуры коллагенов различных типов. Кроме того, некоторые из них (например, несовершенный остеогенез и НДСТ) связаны с нарушениями

функционирования костной ткани [4]. Поэтому исследования возможных механизмов адаптации кости важны для исследований этих болезней, что возможно позволит разработать новые методы лечения этих заболеваний.

Целью данной работы исследования – определить методом векторной силовой микроскопии пьезоотклика эффективные пьезоэлектрические коэффициенты d_L и d_V , соответствующие деформациям фибриллы в направлениях параллельно и перпендикулярно плоскости подложки, соответственно. Для достижения цели решались следующие задачи:

1) экстрагировать фибриллы коллагена I типа из среза кости человека;

2) подтвердить структурную целостность экстрагированных фибрилл;

3) измерить латеральную и вертикальную амплитуды колебаний кантилевера с зондом, находящимся в контакте с фибрилой или подложкой при различных значениях постоянного электрического смещения на зонде;

4) рассчитать величины d_L и d_V при различных значениях постоянного смещения на зонде;

5) определить истинные значения d_L и d_V с учетом компенсации колебаний, вызванных действием электростатических сил.

После измельчения среза кости, полученный порошок помещался в раствор с 0,5 М раствором ЭДТА-2Na на 5 суток, после чего отмывался и помещался в 0,5 М раствор уксусной кислоты на 10 суток. По истечении этого времени, образец последовательно трижды отмывался и подвергался ультразвуковому диспергированию, после чего полученная суспензия наносилась на золотую подложку и высушивалась.

После высадки на подложку, было проведено исследование поверхности подложки методом атомно-силовой микроскопии в полуконтактном режиме. Обнаруженные на поверхности подложки фибриллы были проверены на структурную целостность путем измерения D-периода (рисунок 1). Средний D-период составил 67,57 нм, что соответствует D-периоду коллагена I типа.

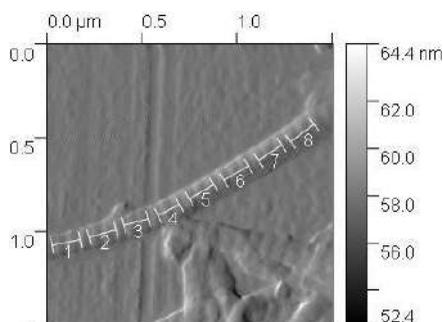


Рисунок 1. АСМ-изображение фибриллы коллагена

После подтверждения структурной целостности фибриллы производилось измерение ее пьезоотклика методом векторной силовой микроскопии пьезоотклика. Для компенсации колебаний кантилевера, обусловленных электростатическими силами, возникающими при контактной разности потенциалов между подложкой и проводящим зондом, к зонду прикладывалось постоянное электрическое смещение.

Пьезоэлектрические коэффициенты d_L и d_V рассчитывались на основе выражения: $A_v = d \cdot V_{ac} \cdot Q$, где d – пьезоэлектрический коэффициент, V_{ac} – амплитуда переменного напряжения между зондом и подложкой, Q – добротность кантилевера, A_v – амплитуда колебаний кантилевера. Для латеральной компоненты: $Q = 160$, $V_{ac} = 5$ В. Для вертикальной: $Q = 60$, $V_{ac} = 1$ В.

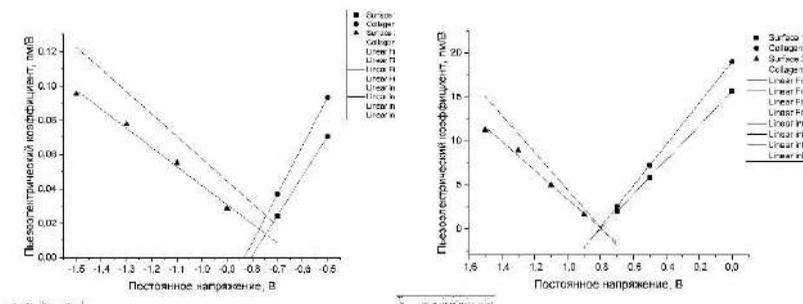


Рисунок 2. Зависимости значений d_L (слева) и d_V (справа) от постоянного смещения на зонде

Результаты определения пьезоэлектрических коэффициентов d_L и d_V при постоянном электрическом смещении на зонде диапазоне от -0,5 В до -1,5 В с шагом в 0,2 В представлены на рисунке 2. Минимальные значения пьезоэлектрических коэффициентов при смещении на зонде -0,7÷-0,8 В соответствуют их истинным значениям когда компенсируется действие электростатических сил: $d_L = 0,025$ пм/В, $d_V = 0,2$ пм/В.

Таким образом, в работе методом векторной силовой микроскопии пьезоотклика измерены эффективные пьезоэлектрические коэффициенты фибрилл коллагена I типа, соответствующие ее деформациям в направлениях параллельно и перпендикулярно плоскости подложки.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Fukada, E.* On the piezoelectric effect of bone /E. Fukada, I. Yasuda // *JPSJ*. 1957. Vol. 12. P. 1158-1162.
- [2] *Fukada, E.* Piezoelectric Effects in Collagen/ E. Fukada, I. Yasuda // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1964. Vol. 3. P. 117.
- [3] *Canelon, S. P.* β -Aminopropionitrile-induced reduction in enzymatic crosslinking causes in vitro changes in collagen morphology and molecular composition / S. P. Canelon, J. M. Wallace // *PLoS ONE*. 2016. Art.num. 0166392.
- [4] Коллагеновые болезни / *Фоломеева О. М.* // Киреев — Конго // М.: Большая российская энциклопедия. 2009. С. 481.

Александров Александр Алексеевич,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, 7 906 992 89 29,
alexandrov.alex2000@mail.ru

Определение кислородного индекса в сверхпроводящем купрате YBCO методом йодометрии

П. Е. Шарапов

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент С. А. Сычёв

Аннотация: В данной статье рассматривается проблема определения содержания слабосвязанного кислорода методом йодометрии в образцах сверхпроводящей керамики оксида иттрия-бария-меди (YBCO). Дается практическая реализация одного из методов такого определения, а так же приводятся данные по определению сверхпроводящей фазы в образцах YBCO.

Ключевые слова: сверхпроводники, высокотемпературная сверхпроводимость, YBCO, содержание слабосвязанного кислорода.

Введение

Сверхпроводимость — свойство некоторых материалов обладать строго нулевым электрическим сопротивлением при достижении ими температуры ниже определённого значения (критическая температура T_c). Вещества, обладающие сверхпроводимостью, называются сверхпроводниками. Они подразделяются на два больших класса: низкотемпературные ($T_c < 77$ К) и высокотемпературные ($T_c > 77$ К, сокращенно ВТСП). Наибольшая известная критическая температура при атмосферном давлении у керамики $HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+x}$, легированной фтором, равна 138 К.

Среди ВТСП выделяется особо купрат иттрия-бария ($YBa_2Cu_3O_{7-x}$, сокращенно YBCO), обладающий критической температурой в 92-93 К. Этот сверхпроводник был открыт в 1987 году командой из университета Алабамы.

Содержание слабосвязанного кислорода в сверхпроводнике YBCO существенно влияет на его критические параметры. Известно, что при кислородном индексе ниже 6.5 YBCO уже не является высокотемпературным сверхпроводником (ВТСП), а ниже 6.0 уже не проявляет сверхпроводящих свойств даже при температуре жидкого гелия.

При повышении его до 6.93-6.95 критическая температура возрастает до 92-93 К.

В настоящее время создаются различные устройства и системы с использованием высокотемпературных сверхпроводников. К примеру, это сверхпроводящие сепараторы, ЯМР-томографы, ускорители заряженных частиц и многое другое. Перспективными являются создание и разработка и освоение серийного производства СКВИДов (сверхпроводящий квантовый интерференционный детектор) - классов электронных сверхпроводниковых приборов для измерения очень малых магнитных полей. Это открывает новые возможности в исследованиях фундаментальной физики, в частности, дипольного момента электрона. Особое внимание стоит обратить на использование сверхпроводников в квантовых вычислениях. Чаще всего для этого используются сверхпроводящие кубиты, использующие эффект Джозефсона. Так что сверхпроводимость является важным и перспективным направлением исследования в современной физике.

Актуальность

Содержание кислорода (и тем самым СП-фазы) влияет на критические параметры сверхпроводника YBCO, такие как критическая температура и критическое магнитное поле. Это означает, что проблема определения содержания слабосвязанного кислорода в структуре актуальна. Несмотря на множество методов определения кислорода в высокотемпературных сверхпроводниках, метод йодометрии остается одним из наиболее точных и надежных. Определение слабосвязанного кислорода в сверхпроводнике также позволяет оценить содержание сверхпроводящей фазы в объеме образца.

Цель и задачи исследования

Цель исследования – определить кислородный индекс в синтезированных образцах YBCO методом йодометрии. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Синтезировать образцы YBCO.
2. Растворить навеску в смеси растворов KI и HCl.

3. Протитровать полученный бурый раствор тиосульфатом натрия до исчезновения окраски.
4. Используя уравнения реакций из пп. 2-3, найти содержание кислорода в образце.

Экспериментальная часть

В данной работе произведен анализ содержания кислорода известным методом йодометрии. Был проведен опыт по измерению титра $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$. Для этого был взят стандартный 0.1М раствор I_2 в водном растворе KI: одну ампулу стандартного фиксаналя растворили точно в 500 мл воды. Отобрали в колбу 10 мл приготовленного образцового раствора и из бюретки по каплям приливали водный раствор $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ неизвестной концентрации (приблизительно 0,1 М). В момент смены окраски раствора на светло-желтую в качестве индикатора добавляли 5 капель 1% раствора крахмала, который из-за присутствия йода окрасил весь раствор в темно-синий цвет. Титрант приливали до тех пор, пока окраска раствора не исчезнет. Результаты помещены в следующую таблицу:

Таблица 1. Результаты опыта по определению титра $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$.

Опыт	V_i , мл	V_i/m , мл/мг
1	9.8	9.8
2	10	10.2
3	9	9

На основании этого был сделан вывод, что молярность раствора $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ составляет также 0.1М с точностью 2-4%. Далее следовали два опыта, которые позволили нам найти содержание кислорода в образце керамики YBCO.

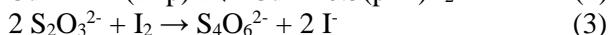
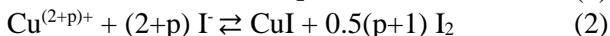
Опыт 1: Навеску 50 мг YBCO поместили в колбу на 100 мл и прилили 30 мл H_2O и 10 капель HCl (конц.), после чего кипятили 10 минут до растворения навески и после охлаждения добавили 15 мл 10% раствора KI и протитровали $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$.

Опыт 2: Навеску 50 мг YBCO поместили в колбу на 100 мл и прилили 15 мл 10% раствора KI и 10 капель HCl (конц.), после чего перемешали до полного растворения и протитровали $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$.

Каждый из опытов был проведен по три раза.

Методика изложена в работе [1]. Опыты 1 проведен при кипячении раствора, содержащего Cu^{3+} (который отвечает за слабосвязанный кислород), этот ион переходит в Cu^{2+} . Опыт 2 учитывает Cu^{3+} уже без разложения.

Уравнения протекших реакций можно записать:



где p – избыток степени окисления меди в образце, т.е. средняя степень окисления меди в образце равна $2+p$.

Уравнение (1) описывает восстановление йода ионами меди после кипячения, а уравнение (2) – до кипячения.

Из уравнений (1) и (2) очевидно, что при равных массах навески в двух опытах отношение объемов пошедшего на титрование раствора $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ равно $p+1$.

Расчет кислородного индекса

На основании проведенных трех опытов 1 получены три объема $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ и три отношения объемов к массе навески (50 мг):

Таблица 2. Объемы титранта ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$) и их отношения к массе навески m после кипячения

Опыт	V_i , мл	V_i/m , мл/мг
1	9.6	0.192
2	9.5	0.190
3	9.65	0.193

Среднее значение $(V_i/m)_{\text{ср}} = 0.1917$ мл/мг с погрешностью около 4%.

На основании трех опытов 2 получены три объема $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ и три отношения объемов к массе навески:

Таблица 3. Объемы титранта ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$) и их отношения к массе навески m до кипячения

Опыт	V_i , мл	V_i/m , мл/мг
1	12.1	0.242
2	12.2	0.244
3	12.0	0.240

Среднее значение $(V_i/m)_{cp} = 0.242$ мл/мг с погрешностью около 4%.

Можно было бы взять объемы растворов без деления их на массу навески, так как массы навесок в первых двух опытах равны (см. выше).

Определим кислородный индекс по формуле:

$$x = 6.5 + 1.5 \cdot p,$$

где p найдем из соотношения:

$$\frac{\langle \frac{V}{m} \rangle_2 - \langle \frac{V}{m} \rangle_1}{\langle \frac{V}{m} \rangle_1} = \frac{0.242 - 0.1917}{0.1917} = 0.2624$$

Отсюда: $x = 6.5 + 1.5 \cdot 0.2624 = \mathbf{6.894}$.

Более точные формулы можно найти в [2] и [3].

Выводы

В результате проведенных экспериментов по йодометрии керамического образца YBCO выяснено, что образец по кислороду отвечает формуле $YBa_2Cu_3O_{6.894}$. Точность определения кислородного индекса можно значительно улучшить, если применять более точные весы и бюретки для титрования.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Гражулене С.С., Карпов Ю.А.*. Аналитический контроль материалов ВТСП // Журнал всесоюзного химического общества им. Д.И. Менделеева, т. XXXIV (1989), с. 537-543.
- [2] *Nazzari A.I. and Lee V.Y.* New procedure for determination of [Cu-O]_p charge and oxygen content in high T_c copper oxides// Physica C. 153-155 (1988) 1367.
- [3] *Wu Ming Chen, Chen J., Jin X.* A modified function of the formula of double iodometric titration // Physica C. 276 (1997) P. 132-138.

Шарапов Павел Евгеньевич

Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс магистратуры, КОиЭФ,

644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238, tost_00@mail.ru

Воздействие мощного ионного пучка наносекундной длительности на хлорированные каучуки

П. А. Поляков

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент В. С. Ковивчак

Аннотация. В работе исследуется воздействие мощного ионного пучка (МИП) наносекундной длительности на хлорированные каучуки. Была отработана методика приготовления образцов для облучения. Рассмотрена морфология поверхностей, облученных образцов хлоркаучука и проведено измерение элементного состава.

Ключевые слова: хлорированный каучук, ферроцен, мощный ионный пучок, углеродные нановолокна.

Известно, что контролируемая термообработка хлорированных каучуков в инертной атмосфере может привести к появлению различных углеродных материалов чьи свойства могут различаться в зависимости от химического состава хлоркаучука и условий его обработки. Изменяя параметры термообработки и химического состава, можно контролировать структуру и микроструктуру получаемых материалов.

Целью данной работы является исследование морфологии поверхности хлорированного каучука (чистого и с добавкой ферроцена) при воздействии на него мощного ионного пучка наносекундной длительности.

В ходе подготовки образцов к облучению МИП мы столкнулись с проблемой связанной с отслаиванием хлоркаучука от подложек, на которые они наносились. Решением данной проблемы стала сушка наносимых пленок в атмосфере паров растворителя.

В работе облучение образцов проводилось на ускорителе «Темп», имеющем следующие параметры: протонно – углеродный пучок (~30% H^+ и 70% C^+) с энергией частиц $E \approx 200$ кэВ, длительность импульса облучения составляла $\tau = 60$ нс. Остаточное давление в камере ускорителя составляло 5×10^{-3} Па.

Образцы представляют из себя чистый хлоркаучук и хлоркаучук с добавлением ферроцена, нанесенные на подложки

из полистирола и натрий-силикатного стекла размером не превышающем $15 \times 15 \text{ мм}^2$. Морфологию поверхности и состав поверхностных слоев полимера исследовали с помощью растровой электронной микроскопии. Перед исследованием на поверхность полимерного слоя, имеющего низкую проводимость, наносили тонкий слой ($\sim 10 \text{ нм}$) платины.

В ходе исследования образцов, облученных МИП, нами было установлено, что морфология и элементный состав существенно изменяются. Изменение морфологии выражается тем, что на поверхности образцов образуются поры со средним диаметром $1,3 \text{ мкм}$. На рисунке 1 представлена поверхность хлорированного каучука после его облучения МИП.

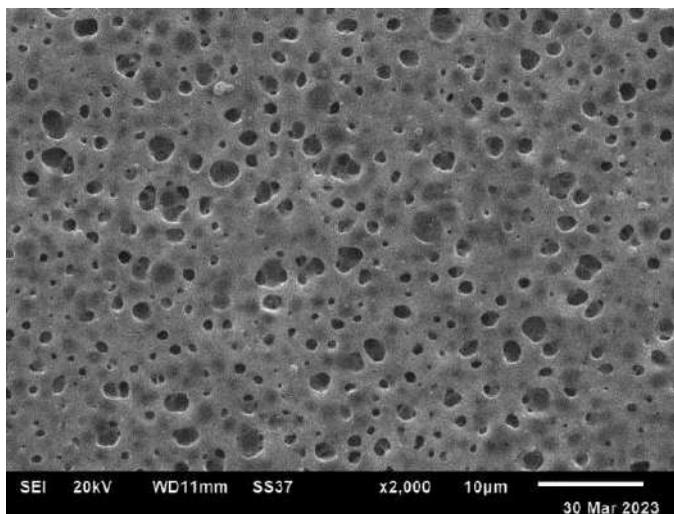


Рисунок 1. Поверхность хлоркаучука после его облучения МИП.

Изменение же элементного состава облученных хлоркаучуков заключается в том, что доминирующим элементом стал углерод с долей в среднем 84% . Связано данное изменение с тем, что хлор, содержащийся в хлоркаучуке, содержание которого составляло около 65% , удаляется в ходе разложения полимера при его облучении. В таблице 1 представлен элементный состав одного из облученных образцов хлоркаучука.

Таблица 1. Элементный состав облученного образца каучука (ат. %).

Spectrum	C	O	Cl	Pt
Spectrum 1	86.90	1.53	11.43	0.14
Spectrum 2	86.23	1.51	12.13	0.13
Spectrum 3	81.05	1.11	17.67	0.17
Spectrum 4	84.45	1.27	14.13	0.15
Spectrum 5	82.77	1.67	15.41	0.15
Spectrum 6	79.78	1.33	18.89	-
Сред. значение	84.29	1.41	14.15	0.15

Также было установлено то, что подложки, на которые были нанесены образцы хлоркаучука, несущественно влияют на получаемые результаты.

В тоже самое время добавление в хлоркаучук ферроцена в качестве катализатора оказывает существенное влияние на морфологию поверхности образцов. Выражаются эти изменения в том, что на поверхности образца образуются разнообразные по виду и размеру углеродные волокна. На рисунке 2 представлены выше описанные изменения морфологи образца.

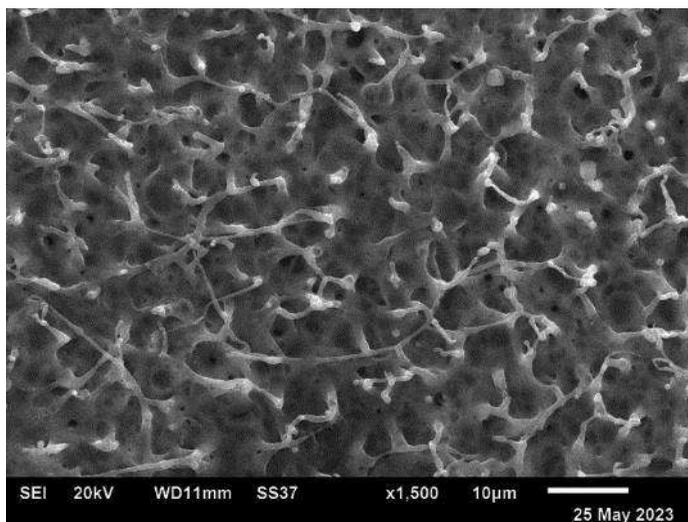


Рисунок 2. Поверхность хлорированного каучука с добавлением ферроцена после облучения МИП.

Данные, полученные в ходе работы, могут быть применены для изготовления углеродных слоев и, впоследствии, создания гибких сенсоров, супермикроконденсаторов и аккумуляторов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Sturman Barry T.* Notes on chlorinated rubber and some other chlorine donor // *Journal of Pyrotechnics*, Issue 22, Winter 2005.
- [2] *Xu B., Wu F., Chen S., Cao G., Zhou Z.* A simple method for preparing porous carbon by PVDC pyrolysis // *Journal Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects: Volume 316, Issues 1–3, 5 March 2008, P. 85-88.*
- [3] *Qiana Li, Huazhanga, Wei Huayia, Li, Zhang Yina, Hu Youlianga.* Facile preparation and proerties of porous carbon from chlorinated polymer with high chlorine content // *Journal Colloids and Surfaces A - Physicochemical and Engineering Aspects: Volume 579, 20 October 2019.*
- [4] *Dodson B., McNeill I. C.* Thermal degradation of chlorinated rubber: Evidence for an alternative cyclic structure for chlorinated rubber // *Journal of Polymer Science: Polymer Chemistry Edition.*
- [5] *Ковивчак В.С., Арбузов А.Б., Тренихин М.В.* Влияние предварительной термической обработки хлорированного поливинилхлорида на формирование углеродных нановолокон на его поверхности при воздействии мощного ионного пучка // *Журнал Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. №7. 2020. С. 47-51.*

Поляков Петр Алексеевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, Физический факультет,
644077, г. Омск, пр. Мира 55-А, poljakov1999ppa@mail.ru.

Секция
«ДИСКРЕТНАЯ МАТЕМАТИКА
И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ»

**Приближенный алгоритм кластеризации вершин графа с
ограничением числа кластеров**

Д. Е. Витютнев

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. В. П. Ильев

Аннотация. В задаче кластеризации необходимо разбить заданное множество объектов на подмножества (называемые кластерами) таким образом, чтобы объекты внутри одного кластера были более похожи друг на друга, чем объекты из разных кластеров. В данной работе речь пойдет о задаче кластеризации вершин графа, в которой вершины обозначают объекты, а ребра – их сходство и требуется минимизировать число ребер между кластерами и число недостающих ребер внутри кластеров. В работе предложен полиномиальный приближенный алгоритм решения задачи кластеризации вершин графа с ограничением сверху числа кластеров и приведена его гарантированная оценка точности для случая решения задачи кластеризации на не более чем 3 кластера.

Ключевые слова: граф, кластеризация, приближенный алгоритм, гарантированная оценка точности.

1. Определения, обозначения и постановка задачи.

Будем рассматривать только *обыкновенные* графы, то есть неориентированные графы без петель и кратных ребер.

Граф называется *кластерным*, если каждая его компонента связности является полным графом. Обозначим $M(V)$ множество всех кластерных графов на множестве вершин V , $M_k(V)$ – множество всех кластерных графов на V , имеющих ровно k компонент связности, $M_{\leq k}(V)$ – множество всех кластерных графов на V , имеющих не более k компонент связности, $2 \leq k \leq |V|$.

Пусть дан граф $G = (V, E)$. Через $N_G(v)$ обозначим окрестность вершины v в графе G , т. е. множество вершин графа G , смежных с вершиной v .

Пусть даны графы $G_1 = (V, E_1)$, $G_2 = (V, E_2)$ на одном и том же множестве вершин V . Тогда *расстояние* $\rho(G_1, G_2)$ между ними определяется как:

$$\rho(G_1, G_2) = |E_1 \Delta E_2| = |E_1 \setminus E_2| + |E_2 \setminus E_1|,$$

т.е. $\rho(G_1, G_2)$ – это число несовпадающих ребер в этих графах. Заметим, что $\rho(G_1, G_2)$ является расстоянием Хэмминга между векторами инцидентности графов G_1 и G_2 .

Существует три основные постановки задачи кластеризации вершин графа:

Задача CE (Cluster Editing). Дан произвольный граф $G = (V, E)$. Найти такой кластерный граф $M^* \in M(V)$, что

$$\rho(G, M^*) = \min_{M \in M(V)} \rho(G, M).$$

Задача CE_k . Дан произвольный граф $G = (V, E)$. Найти такой кластерный граф $M^* \in M_k(V)$, что

$$\rho(G, M^*) = \min_{M \in M_k(V)} \rho(G, M).$$

Задача $CE_{\leq k}$. Дан произвольный граф $G = (V, E)$. Найти такой кластерный граф $M^* \in M_{\leq k}(V)$, что

$$\rho(G, M^*) = \min_{M \in M_{\leq k}(V)} \rho(G, M).$$

Все перечисленные задачи являются NP -трудными [1-3]. Задачи CE_k и $CE_{\leq k}$ NP -трудны для любого фиксированного $k \geq 2$.

Построением приближенных алгоритмов решения перечисленных задач занимаются различные группы математиков по всему миру. В частности, для задачи $CE_{\leq 3}$ Ильевым В.П., Ильевой С.Д. и Моршининым А.В. [4] был предложен $(6 - 12/|V|)$ -приближенный алгоритм.

В настоящей работе предложен полиномиальный приближенный алгоритм решения задачи $CE_{\leq k}$ и приведена его гарантированная оценка точности для случая $k = 3$.

2. Приближенный алгоритм для задачи $CE_{\leq k}$.

Рассмотрим полиномиальный приближенный алгоритм решения задачи $CE_{\leq k}$.

Алгоритм А.

Вход: граф $G = (V, E)$,

Выход: кластерный граф $M \in M_{\leq k}(V)$.

Обозначим S – множество кластерных графов, которое по ходу алгоритма будет заполняться. В начале $S = \emptyset$.

Шаг 1. Поместить в множество S полный граф $K_n \in M_{\leq k}(V)$.

Шаг 2. Для каждой вершины $v_1 \in V$ построить кластерный граф $M(V_1, V_2)$ следующим образом:

$$V_1 = \{v_1\} \cup N_G(v),$$

$$V_2 = V \setminus V_1.$$

Поместить построенный кластерный граф в множество S .

Шаг i ($i = 3, \dots, k$). Для каждого упорядоченного набора не смежных в графе G вершин $(v_1, v_2, \dots, v_{i-1}) \in V \times V \times \dots \times V$ построить кластерный граф $M(V_1, V_2, \dots, V_i)$ следующим образом:

$$V_1 = \{v_1\} \cup N_G(v_1),$$

$$V_2 = \{v_2\} \cup (N_G(v_2) \setminus V_1),$$

....

$$V_{i-1} = \{v_{i-1}\} \cup (N_G(v_{i-1}) \setminus (V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_{i-2})),$$

$$V_i = V \setminus (V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_{i-1}).$$

Поместить построенный кластерный граф в множество S .

Шаг $k+1$. Среди всех кластерных графов из множества S выбрать ближайший к G .

Конец.

Замечание 1. Трудоемкость алгоритма $O(n^{k+1})$.

Действительно, самым трудоемким шагом алгоритма является последний шаг – шаг $k + 1$. На нем среди всех построенных кластерных графов мы выбираем ближайший к G . Число построенных графов – полином от n^{k-1} . Для каждого графа необходимо посчитать число ребер, в которых он отличается от графа G , эта операция имеет трудоемкость $O(n^2)$. Таким образом, трудоемкость алгоритма составляет $O(n^{k+1})$.

Теорема 1. Алгоритм A_1 является 5-приближенным для $k=3$. То есть, для любого графа G

$$\rho(G, M) \leq 5\rho(G, M^*),$$

где M^* – оптимальное решение задачи $CE_{\leq 3}$ на G , а M – приближенное решение, полученное алгоритмом A .

Замечание 2. Гарантированная оценка точности алгоритма A для $k=3$, равная 5, является недостижимой, за исключением тривиального случая, когда $\rho(G, M) = \rho(G, M^*) = 0$. Следовательно, есть надежда улучшить данную оценку.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Krivanek M., Moravek J.* NP-hard problems in hierarchical-tree clustering // *Acta informatica*. 1986. V.23. P.311–323.
- [2] *Shamir R., Sharan R., Tsur D.* Cluster graph modification problems // *Discrete Appl. Math.* 2004. V. 144, N 1-2. P. 173–182.
- [3] *Агеев А.А., Ильев В.П., Кононов А.В., Талевин А.С.* Вычислительная сложность задачи аппроксимации графов // *Дискрет. анализ и исслед. операций*. 2006. Серия 1. Т. 13, N 1. С. 3–11.
- [4] *Ильев В.П., Ильева С.Д., Моршинин А.В.* Алгоритмы приближенного решения одной задачи кластеризации графа // *Прикладная дискретная математика*. 2019. №45. С.64–77.

Витютнев Дмитрий Евгеньевич,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ФЦТК,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
dimason99@gmail.com

Методы аутентификации человека по клавиатурному почерку

А. Л. Голованов

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Н. Ф. Богаченко

Аннотация. В данной статье представлены два типа аутентификации по клавиатурному почерку по разным структурам набираемого текста. Проведён обзор новых методов, разработанных для аутентификации по произвольному тексту.

Ключевые слова: клавиатурный почерк, произвольный текст.

Аутентификацию пользователя по клавиатурному почерку можно разделить на две категории: по моменту её проведения (однократная или непрерывная) и по вводимому тексту для аутентификации (фиксированный или произвольный текст).

Фиксированным текстом является заранее определённый и неизменяемый во время аутентификации текст, состоящий из некоторого ограниченного количества символов (например, пароль). Вместе с сохранением фиксированного текста пользователя сохраняется и динамика нажатия клавиш пользователя при его вводе. При аутентификации будет сравниваться не только сам пароль, но и то, как он вводился.

Для аутентификации человека по фиксированному тексту предложено множество различных статистических и нейросетевых методов. Например, к ним можно отнести алгоритмы KNN, SVM, Random Forest, MLP и XGBoost. Они достаточно эффективны для фиксированных текстов, в работе [2] приводится сравнение.

Менее исследованным разделом аутентификации по клавиатурному почерку является аутентификация по произвольному тексту, не имеющему ограничений по длине и формату. Эта задача исходит из того, что после введения правильным пользователем пароля, доступ может быть передан другому лицу, что должно быть также отслежено по изменившемуся компьютерному почерку.

Алгоритм для свободного текста Гунетти и Пикарди [3] основан также на расстояниях между двумя выборками. Если расстояние больше порогового значения, то проверяемая выборка динамики нажатия клавиш считается неверной.

Этот алгоритм оперирует с n -графами — несколькими последовательными нажатиями клавиш, где n — количество нажатий. Для его работы используются две меры: скорость набора текста (A -мера) и степень разброса (R -мера) для измерения сходства двух выборок.

R -мера основана на длительности n -графов, то есть времени между первым и последним из n последующих нажатий клавиш. Сначала они извлекаются из каждого образца, затем определяются n -графы, которые являются общими для двух выборок, список для каждой выборки упорядочивается по среднему времени (также с использованием алфавитного порядка).

A -мера сравнивает абсолютное время n -графов, чтобы убедиться, что скорость набора текста достаточно схожа между двумя образцами, чтобы быть полученной от одного и того же пользователя.

В работах [4] и [5] предложен новый способ представления данных о динамике нажатия клавиш для нейросетевых алгоритмов. Авторы организуют признаки в матрицу переходов, подобную изображению, с несколькими каналами, где каждая строка и столбец представляют собой клавишу на клавиатуре (каждую из 26 букв английского алфавита, цифры 0-9 и спец-клавиши), а глубина соответствует различным категориям признаков. Их результаты показывают, что свёрточная нейронная сеть на основе такой организации данных даёт лучший результат, чем на основе разделения свободного текста на последовательность «фиксированных» текстов одинаковой длины.

В работе [1] авторы предложили метрику ITAD (Instance-based Tail Area Density), которая также может использоваться для произвольных текстов. Эта метрика использует площадь хвоста под функцией плотности распределения вероятности (PDF). Если выборка находится ниже медианы, то метрика ITAD определяется

по площади хвоста слева, а если выше медианы, то по площади хвоста справа.

Авторы отмечают, что ITAD работает лучше, чем метрики расстояния, которые основаны на среднем и стандартном отклонении графиков и подвержены влиянию выбросов. Оценка метрики ITAD колеблется в диапазоне от 0 до 0.5 и может быть интерпретирована как мера сходства. Чем больше балл, тем ближе тестовый образец к профилю.

Последние два метода для произвольных текстов были опубликованы недавно и основывались на датасетах клавиатурного почерка на английском языке. В дальнейшем планируется их скомбинировать, проверить эффективность для русского языка и, по необходимости, их доработать.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Ayotte B., Banavar M., Hou D., Schuckers S.* Fast free-text authentication via instance-based keystroke dynamics // *IEEE Transactions on Biometrics, Behavior, and Identity Science*, 2(4) 2020. P. 377–387.
- [2] *Chang H.-C., Li J., Wu C.-S., Stamp M.* Machine Learning and Deep Learning for Fixed-Text Keystroke Dynamics // *Artificial Intelligence for Cybersecurity. Advances in Information Security*, vol 54. Springer, Cham. 2022. 309–329.
- [3] *Gunetti D., Picardi C.* Keystroke analysis of free text. // *ACM Transactions on Information and System Security (TISSEC)*, 8(3). 2005. P. 312–347.
- [4] *Li J.* Keystroke Dynamics for User Authentication with Fixed and Free Text. // 2021. Master's Projects. 1004.
- [5] *Li J., Chang H.-C., Stamp M.* Free-Text Keystroke Dynamics for User Authentication // *Artificial Intelligence for Cybersecurity. Advances in Information Security*, vol 54. Springer, Cham. 2022. P. 357–380.

Голованов Александр Леонидович,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
1 курс аспирантуры, ФЦТК,
644077, Омск, ул. Нефтезаводская, 11, agolovanov@yahoo.com

О моделях целочисленного линейного программирования для задач составления расписаний на одной машине

Ю. В. Захарова

Аннотация. В работе рассматривается два подхода к построению моделей целочисленного линейного программирования для задач составления расписаний на одной машине. Первый подход основан на назначении работ в позиции перестановки, а второй подход учитывает свойство предшествования работ. Обсуждаются вопросы обобщения на случай нескольких машин.

Ключевые слова: модель, расписание, перестановка.

В статье рассматривается два подхода к построению частично целочисленного линейного программирования для задач составления расписаний на одной машине. Отличие подходов будет заключаться в том, каким образом моделируется перестановка работ на машине.

Рассмотрим задачу, в которой необходимо составить расписание выполнения работ из множества $J = \{j_1, \dots, j_n\}$ на одной машине. Для каждой работы $j \in J$ известна ее длительность p_j . В качестве критерия может выступать произвольная регулярная целевая функция [1, 7].

Подход на основе назначения в позиции.

Обозначим через K множество точек событий (позиций перестановки). Введем булевы переменные:

$$x_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{если работа } i \text{ в позиции } k \text{ на машине,} \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Также определим вещественную переменную $C_k \geq 0$, отвечающую за момент окончания работы в точке событий $k \in K$.

Ограничения записываются следующим образом:

$$\sum_{i \in J} x_{ik} = 1, k \in K, \quad (1)$$

$$\sum_{k \in K} x_{ik} = 1, i \in J, \quad (2)$$

$$C_k \geq C_{k-1} + \sum_{i \in J} x_{ik} p_i, k \in K, \quad (3)$$

$$C_k \geq 0, k \in K, \quad (4)$$

$$x_{ik} \in \{0,1\}, i \in J, k \in K. \quad (5)$$

Ограничение (1) гарантирует, что в каждой точке событий выполняется одна работа. Равенство (2) позволяет учесть выполнение всех работ. Ограничение (3) отвечает за вычисление моментов окончания работ в точках событий. Принцип назначения работ на машины представлен на рис. 1.

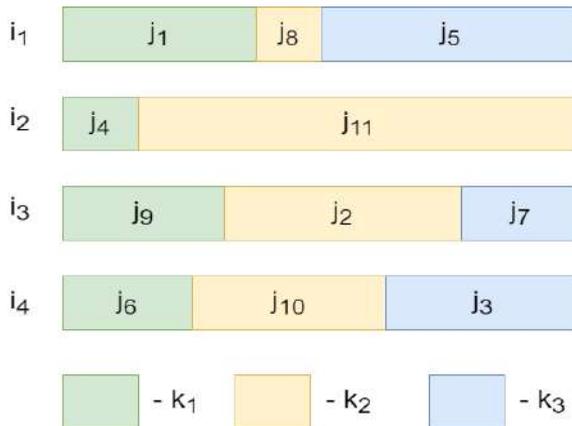


Рисунок 1. Расписание на машинах с назначением работ в точки событий

Подход на основе свойства смежности.

Введем две группы булевых переменных:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если работа } i \text{ непосредственно предшествует работе } j, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

$$y_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если работа } i \text{ предшествует работе } j, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Вещественная переменная $C_j \geq 0$ в данном случае задает момент окончания работы $j \in J$.

Запишем ограничения, введя две дополнительные фиктивные работы 0 и $n+1$ с нулевой длительностью:

$$\sum_{j=1}^{n+1} x_{ij} = 1, i = 0, \dots, n, \quad (6)$$

$$\sum_{i=0}^n x_{ij} = 1, j = 1, \dots, n+1, \quad (7)$$

$$\sum_{i=1}^n y_{iq} - \sum_{i=1}^n y_{ik} + (n+2)x_{qk} \leq (n+1), q, k = 1, \dots, n, \quad (8)$$

$$C_j \geq \sum_{i=0}^n y_{ij} p_i + p_j, j = 1, \dots, n, \quad (9)$$

$$C_i \geq 0, i \in J, \quad (10)$$

$$y_{ij}, x_{ij} \in \{0,1\}, i, j \in J. \quad (11)$$

Ограничения (6) и (7) гарантируют, что каждая работа непосредственно предшествует только одной работе, ровно, как и ей предшествует только одна работа. Неравенство (8) связывает предшествование и непосредственное предшествование работ. Условие (9) позволяет оценить момент окончания каждой работы.

Критерии могут быть сформулированы следующим образом:

общее время завершения

$$C_{\max} \rightarrow \min,$$

$$C_{\max} \geq C_i, i \in J, \text{ или } C_{\max} \geq C_k, k \in K,$$

суммарное время завершения

$$\sum_{j \in J} C_j \rightarrow \min,$$

максимальное временное смещение

$$L_{\max} \rightarrow \min,$$

$$L_{\max} \geq C_i - d_i, i \in J, \text{ или } L_{\max} \geq C_k - \sum_{i=1}^n x_{ik} d_i, k \in K,$$

суммарное запаздывание

$$\sum_{j \in J} T_j \rightarrow \min,$$

$$T_i \geq 0, T_i \geq C_i - d_i, i \in J,$$

$$\text{или } T_k \geq 0, T_k \geq C_k - \sum_{i=1}^n x_{ik} d_i, k \in K,$$

число запаздывающих работ

$$\sum_{j \in J} U_j \rightarrow \min,$$

$$C_i \leq d_i + U_i \text{Big}M, i \in J,$$

$$\text{или } C_k \leq \sum_{i=1}^n x_{ik} d_i + U_k \text{Big}M, k \in K.$$

Дополнительные ограничения могут моделироваться путем соответствующих уравнений и неравенств (см., например, [2, 5, 6]). Такими ограничениями могут выступать ресурсные ограничения возобновимого, невозобновимого и складированного типов [3, 4]. Также могут быть заданы моменты поступления работ в систему, директивные сроки и допустимые отклонения от них.

Предположим, что на множестве работ задано отношение частичного порядка с помощью ориентированного графа $G = (J, E)$, где вершины соответствуют работам и $(i, j) \in E$ означает, что работа j может начать выполнение только после окончания работы i .

В случае подхода на основе назначения работ в позиции частичный порядок может моделироваться следующим образом:

$$\sum_{k=1}^n kx_{ik} \leq \sum_{k=1}^n kx_{jk}, (i, j) \in E.$$

При использовании подхода на основе свойства смежности отношения предшествования могут быть записаны в виде:

$$C_i + p_i \leq C_j, (i, j) \in E,$$

$$x_{ji} = 0, y_{ji} = 0, (i, j) \in E.$$

Обобщение результатов на случай нескольких машин достигается за счет дополнительного индекса машины для булевых переменных и ограничений, отвечающих за закрепление работ за машинами (см. рис. 1).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда N 22-71-10015, <https://rscf.ru/project/22-71-10015/>.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Танеев В.С., Гордон В.С., Шафранский Я.М.* Теория расписаний. Одностадийные системы. М.: Наука, 1984.
- [2] *Blazewicz J., Dror M., Weglarz J.* Mathematical programming formulations for machine scheduling: A survey // *European Journal of Operational Research*. 1991. Vol. 51. N. 3. P. 283-300.
- [3] *Brucker P.* Scheduling Algorithms. Springer, Berlin, Heidelberg, 2007.
- [4] *Demeulemeester E.L., Herroelen W.S.* Project scheduling: a research handbook. Springer Science and Business Media, 2006.
- [5] *Drozdzowski M.* Scheduling for parallel processing. London: Springer, 2009.
- [6] *Floudas C. A., Lin X.* Mixed integer linear programming in process scheduling: Modeling, algorithms, and applications // *Annals of Operations Research*. 2005. Vol. 139. P. 131-162.
- [7] *Garey M.R., Johnson D.S.* Computers and intractability. San Francisco: Freeman, 1979.

Захарова Юлия Викторовна,
Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН,
старший научный сотрудник,
644099, Омск-99, ул. Певцова 13, 7 (3812) 23-67-39,
kovalenko@ofim.oscsbras.ru

Применение градиентного бустинга для прогнозирования физической работоспособности космонавтов

В. С. Каплун

Научный руководитель: д.ф.-м.н., доцент А. В. Еремеев

Аннотация. Статья посвящена решению важной задачи оценки влияния ежедневных тренировок на беговой дорожке на физическую работоспособность космонавтов в условиях невесомости во время космического полета. Цель работы состояла в улучшении качества прогнозирования физиологической работоспособности путем применения алгоритма градиентного бустинга.

Ключевые слова: физическая работоспособность космонавтов, машинное обучение, градиентный бустинг, случайный лес, скользящий контроль, коэффициент детерминации.

Экспериментальные и теоретические исследования показывают, что двигательная, дыхательная и сердечно-сосудистая системы претерпевают функциональные и структурные изменения под действием невесомости, что влечет снижение физической работоспособности космонавтов в условиях длительного полета. Именно поэтому важно разработать систему контроля физического состояния космонавтов [1-3]. Ожидается, что успех разработки такой автоматизированной системы будет основан на методах анализа данных и машинного обучения.

В [4] приведен метод прогнозирования физической работоспособности на основе пройденного расстояния в различных режимах бега, а также с разной его скоростью. Лучшие результаты были достигнуты с помощью ансамблей, основанных на деревьях решений, а именно с помощью случайного леса. Суть построения данного ансамбля заключается в том, что каждая модель обучается на непересекающихся наборах данных, а конечный прогноз модель выдает путем усреднения предсказания каждого базового алгоритма.

Положительный опыт применения данного алгоритма позволяет высказать предположение о том, что градиентный

бустинг может дать прирост в качестве прогнозирования моделей, так как этот алгоритм также является ансамблем моделей, основанных на деревьях решений. Разница в том, что в данном случае базовые алгоритмы учатся последовательно на одном и том же наборе данных, при этом каждое следующее дерево пытается улучшить предсказание предыдущего.

Удаление выбросов из обучающей выборки имеет особенно важное значение, так как объем данных небольшой, и каждое ошибочное наблюдение вносит большой шум в модель, что снижает ее обобщающую способность. Под выбросами в данной задаче нами понимались наблюдения, которые выходили за пределы 3 стандартных отклонений от среднего.

Для обучения была использована библиотека CatBoost [5]. Лучшая модель была выбрана в ходе перебора гиперпараметров по сетке. Сравнивались все комбинации параметров, таких как количество, тип и глубина деревьев.

В процессе обучения также был использован скользящий контроль, при котором обучающие данные разбиваются на k частей: $k-1$ используется для обучения, а оставшаяся часть используется для тестирования. Финальная же проверка происходила на отложенной выборке.

Для оценки качества моделей использовался коэффициент детерминации, который показывает долю дисперсии, которую объясняет модель.

Таблица 1. Сравнение результатов предсказаний, коэффициент детерминации.

Метод/ космонавт	Космонавт 1	Космонавт 2	Космонавт 3
Случайный лес	0.42	-0.01	0.17
Градиентный бустинг	0.7	0.04	0.32

Для дальнейшего применения моделей важно научиться интерпретировать их результаты. Для этого использовался метод оценки важности каждого из входных параметров. Для каждого

параметра функция оценки важности показывает, насколько в среднем изменяется прогноз при изменении значения этого параметра. Чем больше значение важности, тем больше в среднем изменение значения прогноза, если этот признак изменится [6].

Таблица 2. Важность признаков.

Признак/ космонавт	Космонавт 1	Космонавт 2	Космонавт 3
медленный бег в пассивном режиме	21.7	17.9	10.6
быстрый бег в пассивном режиме	48.9	45.5	26.7
медленный бег в активном режиме	11.2	10.4	16.7
быстрый бег в активном режиме	18.1	26.1	45.0

Таким образом, для каждого из космонавтов, на данных о тренировках которых осуществлялась проверка, был получен прирост качества предсказаний. При этом наиболее важным признаком для модели в большинстве случаев оказался быстрый бег в пассивном режиме.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Moore Jr A. D.* et al. Peak exercise oxygen uptake during and following long-duration spaceflight // *Journal of applied physiology*. 2014. Vol. 117. №. 3. P. 231-238.

- [2] *Norsk P.* Blood pressure regulation IV: adaptive responses to weightlessness // *European journal of applied physiology*. 2014. Vol. 114. P. 481-497.
- [3] *Shpakov A.V.* et al. Comparative efficiency of different regimens of locomotor training in prolonged space flights as estimated from the data on biomechanical and electromyographic parameters of walking // *Human Physiology*. 2013. Vol. 39. P. 162-170.
- [4] *Устюгов В.Н.* Использование регрессионных моделей для прогнозирования уровня физической работоспособности космонавта // *Материалы 60-й Международной научной студенческой конференции*. 2022.
- [5] CatBoost is a high-performance open source library for gradient boosting on decision trees [Электронный ресурс] // URL: <https://catboost.ai/> (дата обращения 01.06.2023)
- [6] Feature importance [Электронный ресурс] // URL: <https://catboost.ai/en/docs/concepts/fstr#regular-feature-importance> (дата обращения 11.06.2023)

Каплун Виктория Сергеевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ФЦТК,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, (3812)644238,
victoriaa.kaplun@gmail.com

Планирование инвестиционных проектов при ограниченных финансовых ресурсах

С. А. Торубара

Научный руководитель: д.ф.-м.н. В. В. Сервах

Аннотация. В работе рассматриваются различные аспекты задачи календарного планирования инвестиционных проектов. Описаны понятия потока платежей работ, чистой приведенной прибыли проекта, варианты его финансирования, в том числе в случае использования кредитов. Предложены схемы реализации проекта в случае ограничения на размер кредита. Исследуется ситуация совместного выполнения проектов на примере ипотечного кредитования.

Ключевые слова: календарное планирование, инвестиционный проект, чистая приведенная прибыль.

Календарное планирование является одним из ключевых направлений современной теории оптимизации, так как большое количество задач требует согласование сроков выполнения работ. Такие задачи актуальны в логистике, на производстве, строительстве, транспорте и многих других областях. Крупномасштабные проекты требуют согласования по многим параметрам, включая сроки выполнения работ, движение ресурсов, финансирование и так далее. Важным разделом календарного планирования является эффективное использование инвестиций.

Под инвестиционным проектом будем понимать множество взаимосвязанных работ $V = \{1, 2, \dots, N\}$, выполнение которых направлено на получение прибыли. Взаимосвязь задается технологией выполнения проекта и определяется, частичным порядком E на множестве V . Длительности работ p_j заданы. Для реализации проекта используются трудовые, материальные и финансовые ресурсы. Первые два типа ресурсов могут быть трансформированы в денежный эквивалент: рабочих можно нанять, материалы и оборудование купить или арендовать. Поэтому в рамках проекта рассматривается единственный ресурс – финансовый. Будем предполагать, что в

процессе реализации проекта доход, получаемый от выполнения работ, реинвестируется.

Учитывая, что все ресурсы, необходимые для выполнения проекта, могут быть выражены в денежном эквиваленте, каждую работу j можно характеризовать потоком платежей $(c_j(0), c_j(0), \dots, c_j(\tau), \dots, c_j(p_j))$, где $c_j(\tau)$ – баланс платежей в момент времени $\tau = 0, 1, \dots, p_j$, то есть разность между поступлениями и расходами. Причем, если $c_j(\tau) < 0$, то вложения больше поступлений, а при $c_j(\tau) > 0$ – поступления больше вложений. Величина

$$NPV_j = \sum_{\tau=0}^{p_j} \frac{c_j(\tau)}{(1 + r_0)^\tau}$$

называется чистой прибылью работы j , приведенной к началу выполнения этой работы, где r_0 – ставка по альтернативному безрисковому ликвидному размещению капитала. Если $NPV_j > 0$, то j работа прибыльная, а если $NPV_j < 0$, то убыточная.

Задача календарного планирования инвестиционных проектов заключается в поиске такого расписания выполнения работ $S = (s_1, s_2, \dots, s_N)$, для которого соблюдается технологический порядок

$$s_i + p_i \leq s_j, (i, j) \in E,$$

и чистая приведенная прибыль всего проекта будет максимальной

$$NPV(S) = \sum_{j=0}^N \frac{NPV_j}{(1 + r_0)^{s_j}} \rightarrow \max_S.$$

Эта задача без ограничений на ресурсы. Оптимальное значение целевой функции характеризует безусловную прибыль проекта. Ее можно рассматривать как верхнюю оценку прибыли, которая может быть получена при достаточном финансировании проекта.

Рассмотрим теперь вопросы финансирования проекта. Пусть на горизонте планирования проекта T имеются собственные финансовые ресурсы K_t , $t = 0, 1, \dots, T - 1$. Поиск оптимального расписания при ограничениях собственных средств является классической задачей календарного

планирования и является NP-трудной в сильном смысле [1]. Возможности реализации проекта можно существенно расширить путем привлечения дополнительных средств в виде кредитов. При некоторых допущениях, что процентная ставка по кредиту r фиксирована и не меняется в зависимости от срока и размера кредита, и что погашение кредита может происходить в любой момент, справедливо следующее

Утверждение. Кредит любого вида можно разбить на эквивалентную последовательность кредитов, взятых на единичные временные периоды.

Это позволяет предложить алгоритм расчета собственной прибыли $NPV_{our}(S)$ при заданном расписании S . Пусть F_t – текущий баланс на момент t . Для заданного расписания S вычисляем общий поток платежей проекта $= (C_0, C_1, \dots, C_T)$ простым суммированием потоков платежей работ, установленных в моменты из начала.

Если собственного капитала K_0 не хватает на текущие вложения C_0 в начальный момент времени, то берется кредит под ставку r . К моменту $t = 1$ долг вырастет до величины $F_1 = (K_0 + C_0) \cdot (1 + r)$. Иначе свободные деньги размещаются под ставку r_0 и получим сумму $F_1 = (K_0 + C_0) \cdot (1 + r_0)$.

Значение F_{t+1} для следующих моментов времени $t = 1, 2, \dots, T - 1$ вычисляется рекуррентно. К текущему балансу F_t добавляется собственный капитал K_t и C_t – платеж или поступление в зависимости от знака:

$$F_{t+1} = (F_t + K_t + C_t) \cdot (1 + r), \text{ если } F_t + K_t + C_t < 0;$$

$$F_{t+1} = (F_t + K_t + C_t) \cdot (1 + r_0), \text{ если } F_t + K_t + C_t > 0.$$

Полученный в итоге капитал $F_T + C_T$ дисконтируем к начальному моменту времени. Вычитая исходные капиталовложения K_t , получим значение собственной чистой приведенной прибыли

$$NPV_{our} = \frac{F_T + C_T}{(1 + r_0)^T} - \sum_{t=0}^{T-1} \frac{K_t}{(1 + r_0)^t},$$

которую необходимо максимизировать.

Данная модель предполагает, что в любой момент времени можно взять кредит любого объема. Однако это не всегда реализуемо. Необходимо рассматривать ситуацию, когда размер кредита ограничен. Известно [2], что в этом случае задача является NP-трудной в сильном смысле. Более того, может оказаться так, что при таких ограничениях проект не реализуется. Тогда привлекаем дополнительный проект и за счет совместного выполнения реализуем основной проект. Совместное выполнение нескольких проектов позволяет перераспределить ресурсы и получить дополнительный доход. Благодаря этому, каждый из проектов удается выполнить эффективнее. Справедлива следующая

Теорема. Прибыль от совместного выполнения нескольких проектов не меньше, чем сумма прибылей проектов при их независимом выполнении.

Дополнительная полученная прибыль называется синергетическим эффектом. Установленный факт позволяет эффективно комбинировать различные проекты между собой и обеспечить выполнение основного проекта.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Сервах В.В., Щербинина Т.А.* О сложности задачи календарного планирования проектов // Вестник НГУ. Сер. Математика, механика, информатика. 2008. Т.8. Вып.3. С.105-111.
- [2] *Казаковцева Е.А., Сервах В.В.* Сложность задачи календарного планирования с кредитами // Дискретный анализ и исследование операций. 2015. Т.22, N. 4. С. 35–49.

Торубара Софья Андреевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, ФЦТК,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, +79509519921,
hoshizora921@gmail.com

**Выявление познавательных барьеров у студентов СПО в
процессе обучения физике**

А. М. Барановская

Научный руководитель: д. пед. н., доцент М. П. Ланкина

Аннотация. В статье приводятся определение, классификация познавательных барьеров (ПБ) и их связь с учебными возможностями студентов в процессе обучения физике. Предложен способ выявления ПБ у обучающихся первого курса техникума.

Ключевые слова: познавательные барьеры, учебные возможности, СПО, диагностика.

Проблема низких учебных возможностей студентов СПО в настоящее время стоит как никогда остро, о чем свидетельствует анализ публикаций по данной тематике. При этом наблюдается существенная трансформация самого процесса обучения: меняются стандарты, сокращаются сроки обучения, подход к изучению общеобразовательных дисциплин становится профессионально направленным.

Анализ причин низких учебных возможностей, обучающихся привел к возникновению так называемой «барьерной педагогики». В наиболее общем представлении понятие «барьер» трактуется как некое препятствие, проявляющееся в деятельности любой направленности. Поэтому одной из важнейших задач современного образования является приобретение учащимися опыта преодоления барьеров.

Физика традиционно считается трудным предметом для обучающихся. Причин для этого много, одна из самых важных заключается в том, что в сознании обучающихся объективно существуют познавательные барьеры, мешающие освоению данного предмета. Объективность их существования подтверждается типичностью ошибок, заблуждений и

затруднений в мыслительной деятельности, которые появляются у разных учащихся, обучающихся в разное время, у разных учителей, по разным программам и учебникам.

Одна из первых работ, в которой был проведен всесторонний анализ источника массовых познавательных затруднений обучаемых и поиск методических приёмов их нивелирования при изучении физики, была проведена А. И. Пилипенко [2]. Под психолого-познавательным барьером (ППБ) автор понимает субъективную особенность учащихся, которая заключается в массовом бессознательном воспроизведении типичных затруднений, заблуждений, ошибок в мыслительной деятельности. В работе развивается мысль о познавательных барьерах, в которых видятся причины ошибок, характерных заблуждений обучающихся, проводится классификация.

В работе [1] данная классификация сведена в следующую систему и проанализирована с точки зрения решения физических задач. Выделяются ППБ общего типа (ППБ исходных когнитивных моделей, ППБ технологического стиля мышления, ППБ исторического типа), ППБ логической культуры (ППБ монологики, ППБ свертки мышления, ППБ алогичного мышления), ППБ языкового учебного сознания (ППБ расщепления учебных дисциплин, ППБ неадекватного восприятия речи, ППБ периферии языкового учебного сознания, ППБ слабо развитой регулирующей функции речи).

По мнению автора [2] выявление ППБ различного типа и рефлексия на них обучающихся позволят скорректировать процесс обучения таким образом, чтобы при отсутствии перегрузки обучающихся привести к положительным качественным изменениям результатов обучения.

Нашей задачей выступает разработка способа выявления существующих познавательных барьеров, их диагностика, классификация и разработка методики, позволяющей в процессе обучения физике снизить или в идеале нивелировать затруднения, стоящие перед обучающимися. Для повышения учебных возможностей студентов СПО разрабатывается методика обучения физике, опирающаяся на решение

физических задач и выполнение специальных функционально валидных образующих заданий.

Наличие познавательных барьеров различных типов выявлялись нами на основании тестирования. Тест строился на предметном материале по физике и состоял из десяти вопросов, каждый из которых позволял сделать вывод о наличии того или иного познавательного барьера согласно вышеприведенному списку. В таблице приведены серии групп испытуемых.

Серии групп испытуемых	I группа	II группа
1	Девушки	Юноши
2	Технологическое отделение	Механическое отделение
3	Студенты 1 курса 2018-2019	Студенты 1 курса 2022-2023

Для обработки результатов использовался многофункциональный критерий Фишера [3].

В качестве примера рассмотрим один из вопросов теста: «Капля масла имеет электрический заряд $q = -2,4 \cdot 10^{-19}$ Кл. Определите избыток электронов на капле». Данный вопрос выявляет наличие барьера монологики, поскольку бездумное решение этой задачи приводит к нецелому числу электронов. Будем считать, что «Нет эффекта» при правильном выполнении задания, т.е. понимание студентом указанного аспекта сформировано (студент указал на парадоксальность результата), барьер отсутствует, и «Есть эффект» при ошибочном выполнении задания. При проведении стандартной процедуры расчета (3-я серия результатов), получаем $\varphi^*_{\text{эмп}} = 4,69$.

Полученное эмпирическое значение $\varphi^*_{\text{эмп}}$ находится в зоне значимости, следовательно, и различия свойств по данному критерию значимы (выборки различимы). Аналогичный анализ проведен для ответов на остальные вопросы различными выделенными группами испытуемых.

Анализ результатов привел к следующим выводам. Барьеры всех типов, перечисленные выше, свойственны студентам всех групп, независимо от их пола и специальности. Также было выяснено, что у девушек в большей степени выражен

барьер алогичного мышления, а среди прочих типов барьеров гендерных различий не выявлено.

Значительные статистические расхождения обнаружены в серии 2, где проводилось сравнение между технологическим и механическим отделением. Число студентов-технологов с познавательными барьерами оказалось ниже, хотя у этой группы были выявлены все типы барьеров. Этот вывод не удивителен: средний балл аттестата у поступающих на технологические специальности, как правило, выше, чем у абитуриентов механического отделения.

Также сравнивались результаты исследований, проведенных в 2019 и 2023 году. В указанный период произошли значительные изменения в учебном процессе, в частности, масштабное внедрение в обучение информационных технологий в связи с эпидемией COVID-19. За исключением трех вопросов, связанных с ПБ общего типа, статистически значимых различий между студентами данных выборок не наблюдается.

Полученные результаты говорят о наличии сходных познавательных барьеров у обучающихся несмотря на то, что до поступления в техникум они обучались у разных учителей, а порой и в разных странах, дистанционно и очно.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Ларченкова Л.А.* Физические задачи как средство достижения целей физического образования в средней школе: монография /Л.А. Ларченкова. СПб.: Изд-во РГПУ им. А.И. Герцена, 2013. 158 с.
- [2] *Пилипенко А.И.* Познавательные барьеры в обучении физике и методические принципы их преодоления. Дис. ... д-ра пед. наук. М.: 1997. 242 с.
- [3] *Сидоренко Е.В.* Методы математической обработки в психологии. СПб.: ООО «Речь», 2002. 350 с.

Барановская Антонина Михайловна,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
аспирант 2 года обучения, кафедра общей и экспериментальной
физики, e-mail: a.m.baranowskaya@gmail.com

Практико-ориентированное обучение физике как способ развития познавательного интереса школьников

С. Н. Еремина

Научный руководитель: д.п.н., доцент М. П. Ланкина

Аннотация. Статья посвящена описанию эмпирического исследования развития познавательного интереса школьников к изучению физики в процессе практико-ориентированного обучения. Показано, что домашние экспериментальные задания приводят к статистически значимому повышению уровня познавательного интереса современных школьников.

Ключевые слова: познавательный интерес, практико-ориентированное обучение физике, домашний эксперимент, анкетирование, уровни развития познавательного интереса.

Проблема снижения познавательного интереса обучающихся к изучению физики в школе на данный момент не имеет однозначного решения. Большая роль в повышении эффективности обучения и развитии познавательного интереса обучающихся отводится практико-ориентированному обучению. Методы практико-ориентированного обучения рассматривались многими исследователями, среди них привлекает внимание работа С.Ф. Покровского, посвященная домашнему эксперименту [3]. К сожалению, данная методика обучения не получила широкого распространения, поэтому возникает интерес проверить эффективность домашнего эксперимента как средства повышения познавательного интереса к изучению физики.

Среди множества определений познавательного интереса в качестве базового было выбрано определение Г.И. Щукиной, которая понимает познавательный интерес как «специальное выборочное, наполненное сильными впечатлениями и устремлениями, отношение личности к окружающему миру, его объектам, действиям, процессам» [7]. Это определение позволяет структурировать познавательный интерес, выделив в нём интеллектуальный, эмоциональный и волевой компоненты.

В психолого-педагогической литературе приводятся разные классификации видов и уровней познавательного интереса, а также способы его диагностики (например, [1, 2, 7 и др.]). В данной работе применяется классификация и методика диагностики, предложенная в статье Е.В. Ненаховой [2].

Для организации практико-ориентированного обучения физике был составлен банк заданий. Для разработки банка заданий были использованы различные источники (в их числе [3, 5, 6]). В эксперименте приняли участие 33 обучающихся 7-х классов одной из общеобразовательных школ омской области (20 чел. – 7А, 13 чел. – 7Б).

На констатирующем этапе педагогического эксперимента (начало 1 учебной четверти) было проведено анкетирование по модифицированной анкете Е.В. Ненаховой. В качестве контрольной группы был выбран 7Б класс – с более высокими результатами, а в качестве экспериментальной – 7А, в среднем с более низким уровнем развития познавательного интереса.

В ходе дидактического эксперимента на уроках физики в той и другой группах большое внимание было уделено демонстрационным физическим экспериментам (продемонстрированы учителем, выполнены учителем при участии обучающихся, выполнены обучающимися под руководством учителя), лабораторным работам, самостоятельному решению задач обучающимися и в экспериментальной группе – дополнительно домашнему эксперименту.

В конце второй четверти обучающиеся прошли повторное анкетирование по методике Е.В. Ненаховой с целью определения текущего уровня познавательного интереса.

Для обработки результатов дидактического эксперимента использовались G-критерий знаков и угловое преобразование Фишера [4].

Применение G-критерия знаков позволило обнаружить статистически значимый положительный сдвиг уровня познавательного интереса в экспериментальной группе. В контрольной группе статистически значимого сдвига уровня познавательного интереса обнаружить не удалось.

С помощью критерия Фишера удалось установить, что эффект повышения уровня развития познавательного интереса в экспериментальной группе встречается статистически чаще, чем в контрольной группе.

Статистика ответов учащихся экспериментальной группы на вопросы анкеты позволяет увидеть повышение интереса к изучению физики и домашнему эксперименту. При этом следует отметить, что интерес к обучению в целом в школе значительно ниже. Мотивация к обучению и активность на уроке в сентябре заметно выше, чем в декабре, что можно объяснить влиянием длинного летнего отдыха и накопившейся усталостью к концу учебного полугодия. Интересен тот факт, что в декабре дети чаще выбирают сложные задания и проявляют большее упорство при выполнении учебных задач. Дети стали чаще задавать вопросы учителю, что говорит о большем доверии. Кроме того, обучающиеся стали проявлять больший интерес к заданиям и чаще применять физические знания в повседневной жизни.

В контрольной группе наблюдается незначительное понижение интереса к изучению физики и домашнему эксперименту, что обусловлено мнением ребят о несправедливости организации обучения в параллельных классах; они тоже хотели бы получать в качестве домашнего задания домашний эксперимент, а не теоретическое задание. Интерес к обучению в целом несколько снизился, также наблюдается снижение познавательной активности на уроке. Значительно снизился процент обучающихся, выбирающих более сложное задание и понизился интерес к заданиям в целом. Нет существенных изменений в доле обучающихся, выполняющих домашнее задание самостоятельно и в применении знаний вне урока.

Сопоставление результатов анкетирования двух классов позволяет сделать вывод о том, что практико-ориентированное обучение физике (домашний эксперимент в том числе) повышает познавательный интерес обучающихся. С другой стороны, ощущение несправедливости в распределении учебных заданий нивелирует положительный эффект практико-ориентированного обучения и даже вызывает спад познавательного интереса.

Полученный результат демонстрирует важность эмоциональной стороны обучения, что, в свою очередь, требует дополнительных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Ковтунович М.Г.* Домашний эксперимент по физике. 7-11 классы: пособие для учителя. – М.: Гуманитар. изд. центр ВЛАДОС, 2007. 207 с. (Библиотека учителя физики).
- [2] *Ненахова Е.В.* Диагностика познавательного интереса у обучающихся старших классов средней общеобразовательной школы // Наука и школа. 2014. № 2. С.207-211.
- [3] *Покровский С.Ф.* Опыты и наблюдения в домашних заданиях по физике: Пособие для учителей / Акад. пед. наук РСФСР. - 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Изд-во Акад. пед. наук РСФСР, 1963. 415 с.
- [4] *Сидоренко Е.В.* Методы математической обработки в психологии. - СПб.: ООО «Речь», 2003. 350 с.
- [5] *Смирнов В.А.* Опыты и самоделки по физике. – Советские учебники, 2021. 112 с.
- [7] Физика в играх. – Советские учебники, 2021. 224 с.
- [8] *Шукина Г.И.* Педагогические проблемы формирования познавательных интересов учащихся. – М.: Педагогика. 1988. 208 с.

Еремина Светлана Николаевна,
Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,
2 курс магистратуры, физический факультет,
644077, Омск-77, пр. Мира 55-А, 89088049323,
schsit999@yandex.ru

Использование электронных программных средств при решении математических задач

О. А. Сенькова

Научный руководитель: к.п.н, доцент И. А. Круглова

Аннотация. Статья посвящена актуальной на сегодняшний день проблеме применения электронных программных средств на практических занятиях по математике в вузе.

Ключевые слова: математические задачи, технологии обучения математике, электронные программные средства, компьютерные педагогические технологии.

Компьютеризация образования может считаться неотъемлемой и важной частью нашей реальности, так как развитие информационного общества связано с использованием компьютерных педагогических технологий в образовательном процессе [1].

С развитием высокопроизводительного вычислительного оборудования и с появлением компьютеров и новых программ, можно позволить учащимся использовать их, смещая акцент с типовых упражнений на более глубокое понимание процесса решения [3].

Нами предполагается, что использование электронных программных средств на практических занятиях по высшей математике может повысить эффективность работы, а именно, с помощью программ можно выполнить часть тяжелой вычислительной нагрузки, при этом уделяя большее внимание сути метода решения задач.

По мере приобретения студентами навыков традиционного решения задач, они могут переходить к компьютерным расчетам. Низкий уровень вычислительных навыков и ошибки в расчетах у учащихся отнимают много времени на занятии, что приводит к невозможности рассмотрения на занятии всех типовых задач.

Современные пакеты математического программного обеспечения предлагают пользователям удобные и простые инструменты визуализации, а иногда и анимации.

Например, для решения математических задач можно использовать электронные программные средства, такие как Microsoft Excel, Mathcad, Maple, Mathematica или другие. Эти программы позволяют автоматизировать расчеты, упростить решение задач и ускорить процесс решения.

Альтернативой использования дорогих систем компьютерной математики может быть, использование свободно распространяемого программного обеспечения, такого как Maxima, специальной поисковой системы WolframAlpha, для геометрии программы динамической математики GeoGebra.

Приведем пример использования системы WolframAlpha при нахождении жордановой нормальной формы матрицы A .

Пусть дана матрица $A = \begin{pmatrix} -16 & -17 & 87 & -108 \\ 8 & 9 & -42 & 54 \\ -3 & -3 & 16 & -18 \\ -1 & -1 & 6 & -8 \end{pmatrix}$

Характеристическое уравнение имеет вид $\lambda^4 - \lambda^3 - 3\lambda^2 + 5\lambda - 2 = 0$. Для его решения можно воспользоваться системой WolframAlpha (рис.1).

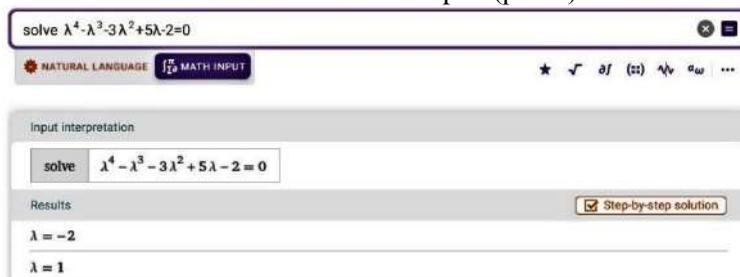


Рисунок 1. Решение уравнения четвертой степени.

Студент понимает алгоритм нахождения ЖНФ, задает системе задачу, но не пользуется готовым решением сразу найти итог задачи, находя только некоторые пункты алгоритма.

Далее, найдя собственные и присоединенные векторы и, получив матрицу перехода, можно воспользоваться программой для нахождения обратной матрицы, а затем и для умножения матриц.

Таким образом, за одно занятие есть возможность обратить внимание на различные случаи построения ЖНФ. Например, можно понять что произойдет, если поменять местами базисные вектора: например набор базисных векторов

$$\left\langle \begin{pmatrix} -17 \\ 8 \\ -3 \\ -1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 12 \\ -6 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle \text{ дает } J = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix},$$

$$\text{другой порядок} \left\langle \begin{pmatrix} 12 \\ -6 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} -17 \\ 8 \\ -3 \\ -1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle \text{ дает } J = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Однако, использование компьютерных систем в образовании, и, в частности при изучении курса математики, вызывает большие дискуссии.

Сторонники традиционной педагогики математики предлагают следующие аргументы:

- устные упражнения и ручные вычисления обеспечивают хорошее развитие ума;
- использование математических пакетов ослабляет способность учащихся вычислять вручную;
- механизмы вычисления, представляемые системами компьютерной математики, могут затушевывать математическое понимание предмета;
- что важнее – приобретение навыков устного счета на основе понимания логики и методов вычислений или навыков получения результата путем нажатия в конкретной ситуации соответствующих клавиш?

Как сторонники, так и противники считают, что использование электронных программных средств в процессе обучения математике:

- является одним из перспективных направлений в образовании;

- позволяет дифференцировать учебную деятельность учащихся на занятиях;
- повышает мотивацию к изучению предмета;
- повышает интенсивность учебно-познавательной деятельности;
- с помощью графики и анимации можно значительно улучшить понимание основных понятий и теорем математики.

Для того чтобы добиться прогресса в обучении математике с помощью компьютерных технологий преподавателю необходимо организовывать и контролировать учебный процесс [2].

В результате работы был сделан вывод. Включение в образовательный процесс систем компьютерной математики при проведении символьных, численных и графических вычислений, позволит интенсифицировать учебный процесс, что весьма благоприятно скажется на творческой самостоятельности и на эффективности будущей профессиональной деятельности.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Вербицкий А.А.* Цифровое обучение: проблемы, риски и перспективы // Электронный научно-публицистический журнал «Номо Cyberus». 2019. №1(6). URL: http://journal.homocyberus.ru/Verbitskiy_AA_1_2019

[2] *Зюзьков В.М.* Учить математике с помощью программирования /В.М. Зюзьков // Современное образование: интеграция образования, науки, бизнеса и власти. 2022. С. 183-186.

[3] Wolfram Mathematica. URL: <https://www.wolfram.com/education/?source=frontpage-carousel/> (дата обращения: 10.06.2023).

Сенькова Ольга Александровна,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
1 курс магистратуры, физический факультет,
644077, г. Омск-77, пр. Мира, 55-А, (3812)647787,
senkova.o.a@yandex.ru

Издается в соответствии с оригиналом,
предоставленным организационным комитетом конференции

Дата выпуска: 05.07.2023
Тираж 8 копий. Объем 4,5 Мб.

Издательство
Омского государственного университета
им. Ф.М. Достоевского
644077, г. Омск, пр. Мира, 55а
тел.: 8 (3812) 22-25-71, 22-25-61, 64-13-07