

Кафедра физики твердого тела

Заведующий – профессор, д.ф.-м.н. **Орешко Алексей Павлович**

Дорогие друзья!



Подготовка первых в СССР специалистов по структурной физике твердого тела началась в Московском университете в 1918 году по инициативе выдающегося кристаллографа и кристаллофизика, автора основной формулы рентгеновского структурного анализа и основоположника отечественного рентгеновского структурного анализа члена-корреспондента РАН Георгия Викторовича Вульфа.

В 1932 году в Московском университете была образована первая в мире специализированная кафедра рентгеновского структурного анализа (с 1953 года – кафедра физики твердого тела).

На кафедре физики твердого тела изучают взаимосвязь структурных, физико-химических и функциональных свойств твердотельных систем на молекулярном, атомном и субатомном уровне для дизайна multifunctional материалов с управляемыми свойствами.

Под «твердотельными системами» понимается все многообразие конденсированных сред как неорганической, так и органической природы: это кристаллические и нанокристаллические твердые тела, аморфные металлы и сплавы, интерметаллические соединения, покрытия и пленки, фотонные кристаллы и ультратонкие многослойные структуры, поверхности и кластеры, нанопровода и наноконтакты, композитные и полимерные материалы, биологические объекты и многое другое. Multifunctional материалы, построенные на базе изучаемых «твердотельных систем», используются в наноэлектронике, фотонике, спинтронике, магнетике, энергетике, биомедицине.

Анализ взаимосвязи структурных, физико-химических и функциональных свойств твердотельных систем проводится при помощи теоретических и экспериментальных методов, а также методов компьютерного моделирования.

В исследованиях применяются, преимущественно, рентгеновские, мессбауэровские, синхротронные, оптические и магнитные экспериментальные методы: рентгеновская дифрактометрия и рефлектометрия; мессбауэровская спектроскопия; резонансная и ядерно-резонансная дифрактометрия, рефлектометрия и спектроскопия синхротронного излучения; электронная микроскопия; рамановская спектроскопия; СКВИД-магнитометрия и магнитокалориметрия.

Компьютерное моделирование проводится на основе расчетов из первых принципов (*ab initio*) с использованием алгоритмов машинного обучения искусственных нейронных сетей.

Изучение взаимосвязи структурных, физико-химических и функциональных свойств твердотельных систем является необходимой составной частью деятельности подавляющего большинства отечественных и зарубежных научных центров. Наши

КАФЕДРА ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

выпускники работают в большинстве академических и отраслевых научно-исследовательских институтов, в высших учебных заведениях, в промышленности, практически на всех специализированных источниках синхротронного излучения в мире.

В связи с обширной программой создания новых отечественных синхротронных центров «СКИФ», «СИЛА» и «РИФ» потребность в специалистах, владеющих синхротронными методами исследования конденсированных сред, будет только расти. Этому критерию в полной мере удовлетворяют выпускники нашей кафедры.

Наши выпускники работают в академических и отраслевых институтах, в высших учебных заведениях, в промышленности. Многие удостоены Российских и международных наград и академических званий.

Кафедру физики твердого тела отличает дружный коллектив и внимательное доброжелательное отношение к студентам, возможность свободного творческого выбора научных направлений исследований и читаемых специальных курсов. Но и от студентов мы также ждем внимательного и доброжелательного отношения к сотрудникам кафедры.

Все сотрудники кафедры будут рады встретить Вас и рассказать подробнее как об актуальных задачах современной структурной физики твердого тела, так и об основных направлениях своей работы.

Ждем вас на кафедре физики твердого тела!

Теоретические исследования взаимодействия рентгеновских лучей, нейтронов и оптических импульсов с кристаллами, многослойными структурами и решетками

Профессор, д.ф.-м.н. Бушуев Владимир Алексеевич



Бушуев В.А. – защитил докторскую диссертацию в 1990 г., профессор по кафедре физики твердого тела с 1999 г.

Под руководством проф. В.А. Бушуева проводятся следующие исследования:

1. Фотонные кристаллы (ФК) представляют собой периодические искусственно созданные структуры, в которых характерный размер периода соизмерим с длиной волны оптического излучения. Наличие такой периодичности приводит к кардинальному отличию

рассеяния и распространения оптических пучков и импульсов в ФК по сравнению с однородными средами. В последнее время огромный интерес вызывают так называемые РТ-симметричные ФК (Р – четность, Т – время), свойства которых не меняются при изменении знака координаты и комплексном сопряжении, т.е. диэлектрическая проницаемость подчиняется условию $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon^*(-\mathbf{r}, \omega)$. Это аналог квантово-механической задачи по обращению пространства и времени, что соответствует средам с усилением и поглощением. В группе В.А. Бушуева проводятся расчеты пространственной структуры пучков (рис. 1) и временной динамики распространения локализованных лазерных импульсов как внутри ФК, так и при их прохождении или отражении от ФК (рис. 2). В последнее время наибольший интерес вызывает проблема появления частотной сингулярности, т.е. стремления отражения и прохождения к бесконечности в ФК с некоторой критической толщиной в режиме начала лазерной генерации.

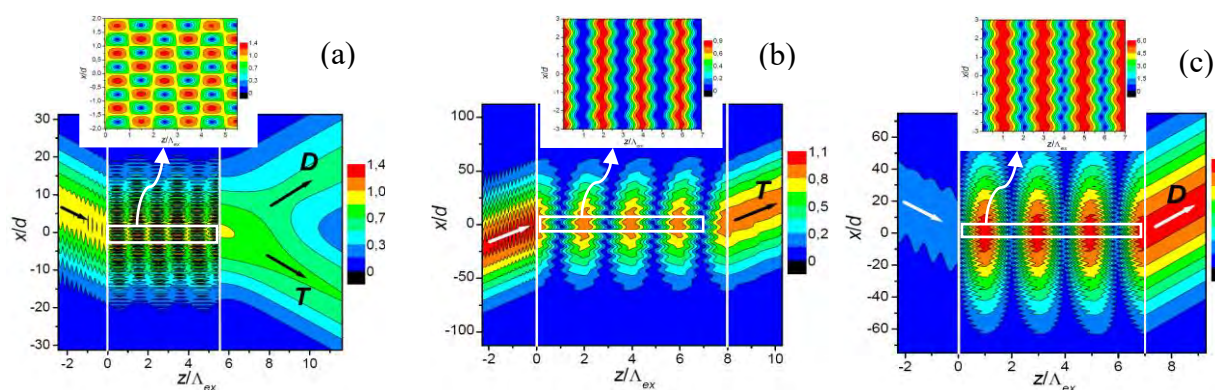


Рис. 1. Пространственное распределение интенсивности лазерного пучка в ФК в условиях брэгговской дифракции в схеме Лауэ. Стрелки показывают направления падения падающего (слева), прошедшего (Т) и дифрагированного (D) пучков для обычного (консервативного) (а) и РТ- симметричного (b, c) фотонных кристаллов.

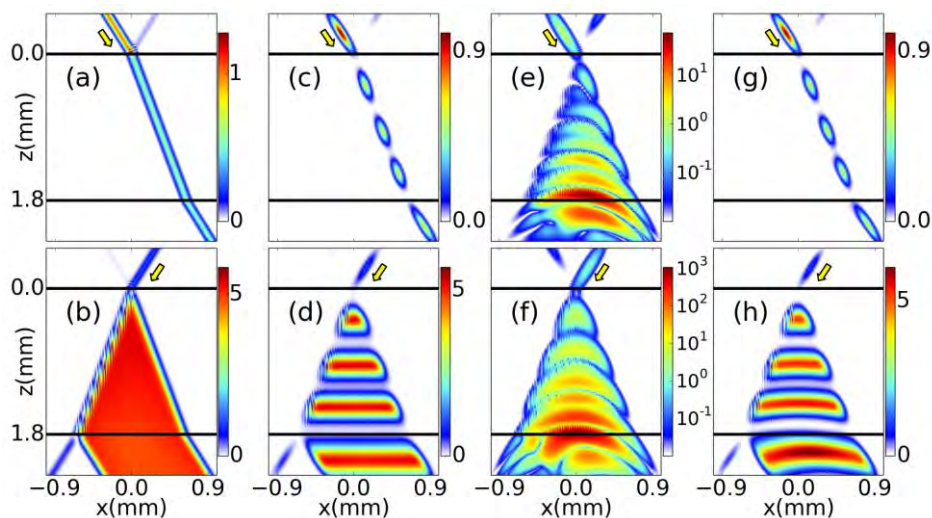


Рис.2. Интенсивности лазерного импульса в различные моменты времени t при углах падения $+30^\circ$ (верхние панели) и -30° (нижние панели) на ФК кристалл в окрестности особой точки распада. Длительность импульса: $\tau = 100$ ps, $t = 11$ ps (a), (b); $\tau = 1$ ps, $t = -1, 2, 5, 8, 11$ ps (c)-(h). Длина волны и период ФК $1 \mu\text{m}$, поперечный размер импульса $60 \mu\text{m}$, толщина ФК 1.8 mm. Стрелками показаны направления падения импульса на ФК.

2. В связи с недавним появлением мощных фемтосекундных рентгеновских лазеров на свободных электронах (РЛСЭ) возникла необходимость в установке в их рабочем канале различных оптических элементов для управления такими характеристиками рентгеновских импульсов как их монохроматизация, коллимация, степень временной когерентности, создание линий задержки для экспериментов типа pump-and-probe и self-seeding. В группе проф. В.А. Бушуева проводятся исследования и расчеты по увеличению степени временной когерентности (рис. 3) и влияния тепловой нагрузки, вызванной мощными импульсами РЛСЭ, на их дифракционное отражение (рис. 4).

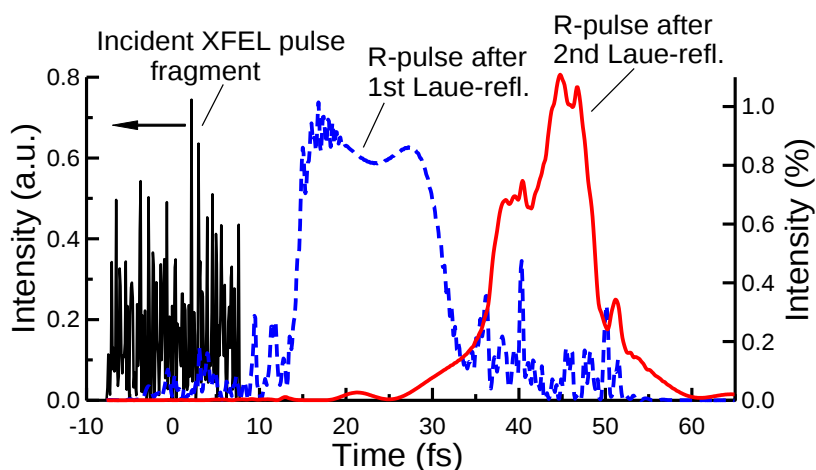


Рис. 3. Гигантское увеличение времени когерентности τ_c импульсов РЛСЭ в условиях Лауэ-дифракции. Черная линия – хаотическая временная структура слабо когерентных падающих импульсов РЛСЭ с $\tau_c = 0.2$ фс, синие и красные линии – после одно- и двукратного отражения этих импульсов ($\tau_c = 12$ и 20 фс).

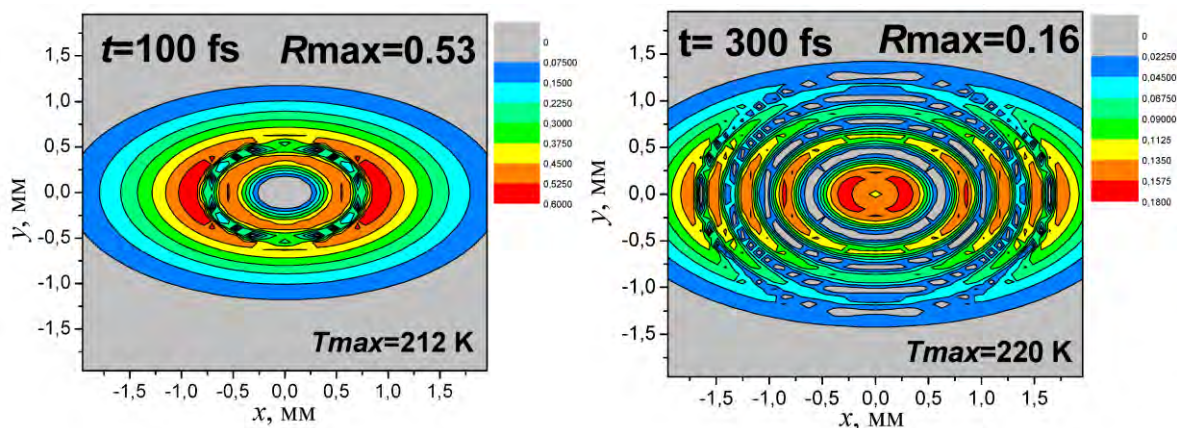


Рис. 4. Двумерные карты пространственного распределения интенсивности дифракционного отражения мощных импульсов РЛСЭ от кристаллов алмаза в результате их неоднородного теплового нагрева под действием облучения импульсами РЛСЭ в различные моменты времени (100 и 200 фс). Длительность пачки импульсов 600 фс.

3. В рамках статистической рентгеновской оптики проводится анализ влияния пространственной (поперечной) когерентности синхротронного излучения (СИ) на формирование фазоконтрастных изображений слабопоглощающих объектов, в том числе и медико-биологических, а также исследуется влияние дефектов различных элементов рентгеновской оптики (зеркала, кристаллы, рентгеновские линзы, фильтры и т.д.) на пространственную когерентность СИ.

Примерные темы работ для студентов 2-го курса:

- 1) Рентгеновская голография. Теория формирования когерентных рентгеновских изображений микро- и нанообъектов (теория, расчёты).
- 2) Влияние пространственной когерентности на эффективность фокусировки с помощью составных рентгеновских преломляющих линз.
- 3) Проблема возникновения сингулярностей (бесконечностей) при отражении коротких лазерных импульсов (“световые пули”) от 1D PT-симметричного фотонного кристалла (теория, расчёты).
- 4) Определение глубины, скорости и времени формирования зеркального и дифракционного отражения нейтронов и рентгеновских лучей (теория, компьютерный эксперимент).

Координаты для связи

Профессор, д.ф.-м.н. **Бушуев Владимир Алексеевич**

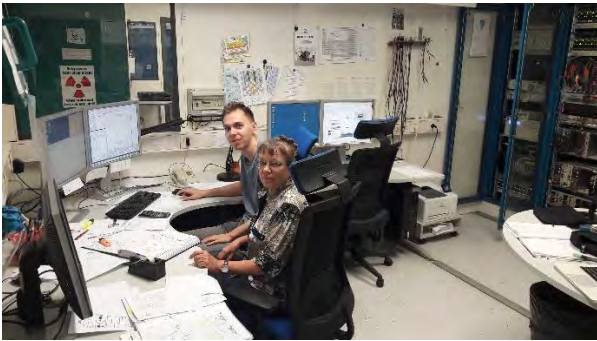
(Дворовый корпус, тел. +7(495)-939-12-26; e-mail: vabushuev@yandex.ru)

<http://kfft.phys.msu.ru/index.php?id=37>

Резонансные методы исследования магнитных ультратонких слоев

Главный научный сотрудник, д.ф.-м.н. **Андреева Марина Алексеевна**
Старший преподаватель, к.ф.-м.н. **Баулин Роман Алексеевич**

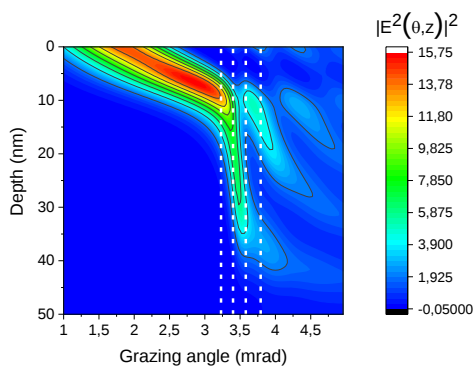
Наша группа проводит исследования магнитного упорядочения в многослойных ультратонких структурах с помощью синхротронного излучения.



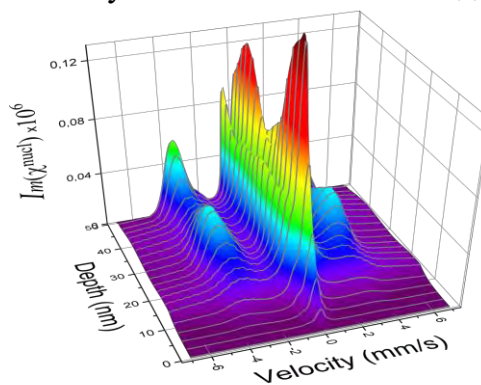
Андреева Марина Алексеевна и аспирант **Баулин Роман Алексеевич** (ныне начальник 2 курса) на измерениях в Гренобле (Европейский синхротрон, 8-17 июля 2018).

Методы направлены на исследование магнитного послойного упорядочения в многослойных ультратонких пленках. Такие объекты являются фактически искусственно созданными слоистыми кристаллами, обнаруживающими уникальные свойства (гигантское магнетосопротивление, аномальный эффект Холла, сверхвысокую сенсорную чувствительность, полуметаллическую проводимость и т.д.), востребованными в различных технологических применениях и являющимися наиболее интересными объектами физики малоразмерных систем.

Резонансное взаимодействие рентгеновского, мессбауэровского или синхротронного излучения в условиях зеркального отражения позволяет получать недоступную другими методами послойную (depth-profiles) информацию о распределении намагниченности или магнитного сверхтонкого поля на ядрах мессбауэровских изотопов в многослойных пленках. Но для таких экспериментов использование синхротронных источников излучения является необходимым.



а)



б)

Рис. 5.

Важным новым результатом наших исследований является доказательство влияния стоячих рентгеновских волн на малые резонансные добавки к интенсивности зеркального отражения, вследствие чего рассмотрение структуры электромагнитного поля в образце позволяет проследить формирование «магнитного сигнала» в отраже-

нии по глубине структуры. На Рис. 5 представлено распределение модуля квадрата электрического поля излучения в пленке $\text{Fe}_{60}\text{Al}_{40}$ на SiO_2 подложке по глубине и для разных углов скольжения падающего излучения на образец (Рис. 5а). Видно, как при изменении угла скольжения в пленке «высвечиваются» разные глубины, так что измерение спектров отражения при углах, отмеченных вертикальными линиями, позволило восстановить распределение магнитного расщепления на ядрах ^{57}Fe по глубине структуры (Рис. 5б) и выявить таким образом формирование ферромагнитных слоев под действием, в исследуемом случае, облучения пленки ионами ^{+}Ne .

В наших исследованиях опробовано важное усовершенствование метода, включающее поляризационный анализ отраженного пучка. На Рис. 6 представлены результаты измерений для образца $[\text{Fe}(15 \text{ \AA})/\text{V}(31 \text{ \AA})]_{20}$, проведенные на Европейском синхротроне в Гренобле. Сопоставление спектров, измеренных без анализа и с анализом поляризации отраженного пучка, позволяет выявить наличие немагнитного окисла в поверхностном слое и проследить интерференцию ядерно-резонансного и релеевского рассеяний.

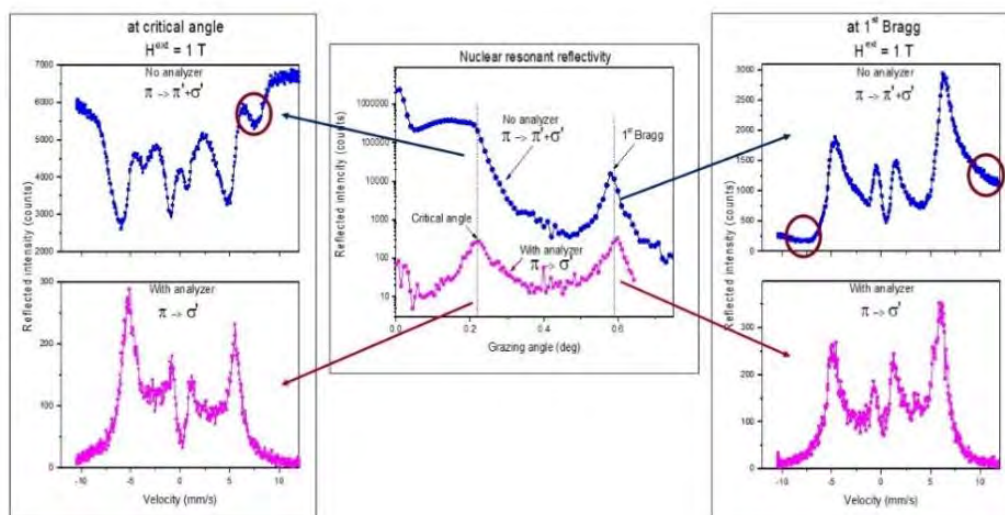


Рис. 6. (в центре) Угловые зависимости ядерно-резонансного зеркального отражения, измеренные без анализа поляризации $\pi \rightarrow \pi' + \sigma'$ и с выделением в отраженном пучке поляризации, ортогональной к поляризации падающего излучения $\pi \rightarrow \sigma'$. (слева и справа) мессбауэровские спектры отражения, измеренные для углов скольжения вблизи критического угла полного отражения и в брэгговском максимуме первого порядка также без анализа $\pi \rightarrow \pi' + \sigma'$ и с анализом поляризации $\pi \rightarrow \sigma'$.

Под руководством Марины Алексеевны защищены 6 кандидатских диссертаций и несколько магистерских диссертаций и дипломных работ. Наши выпускники продолжают активную работу в науке. Среди них:

Баулин Роман Алексеевич. Диссертация «Поляризационные эффекты в мессбауэровской и рентгеновской резонансной рефлектометрии магнитных многослойных структур» (2019). В настоящее время начальник 2 курса физфака МГУ. **Рагульская Анастасия Владимировна.** Защитила магистерскую диссертацию «Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей в скользящей геометрии (GISAXS) на кластерно-слоистых периодических мультислоях» (2018). В настоящее время работает в Германии (Тюбинген). https://vk.com/anastasia_ragulskaya. **Репченко Юрий Леонидович.** Диссертация: «Моделирование резонансных явлений вблизи краев поглощения в условиях отражения рентгеновского синхротронного излуче-

ния от многослойных структур» (2015). Ныне с.н.с. Курчатовского института. **Одинцова Екатерина Евгеньевна**: «Резонансные эффекты вблизи краев поглощения рентгеновского излучения при отражении от многослойных структур» (2011). Преподаватель в РУДН. **Смехова Алевтина Геннадьевна**: «Развитие метода резонансного рентгеновского отражения вблизи $L_{2,3}$ краев поглощения для исследования магнитных мультислоев» (2006). В настоящее время работает в Германии (Берлин).

Наша теоретическая группа – очень дружный коллектив, мы традиционно отмечаем все дни рождения и практикуем «выездные семинары». На фото; выездной семинар на дачном участке Марины Андреевой. Слева направо: асп. Роман Баулин, к.ф.м.н. Юра Репченко (бывший аспирант Андреевой), д.ф.-м.н. Марина Андреева, д.ф.-м.н. Андрей Ломов (коллега из ФТИАН им. К.А. Валиева РАН), проф. КФТТ Володя Бушуев.



Примерные темы работ для студентов 2-го курса:

- 1) Рассеяние рентгеновского (синхротронного) излучения на магнитных наночастицах (расчеты)
- 2) Сужение резонансной линий синхротронного мессбауэровского источника (работа с литературой, расчеты)

Координаты для связи

Главный научный сотрудник, д.ф.-м.н. **Андреева Марина Алексеевна**
(к.1-24, тел. +7(916)-825-75-95 (WhatsApp); e-mail: mandreeval@yandex.ru);
<http://kfft.phys.msu.ru/index.php?id=47>

Структурные исследования нанокристаллического состояния вещества

Главный научный сотрудник, профессор, д.ф.-м.н. **Новакова Алла Андреевна**

Научный сотрудник, к.ф.-м.н. **Петровская Галина Александровна**

Ведущий программист **Панфилов Сергей Иванович**



Современные нанотехнологии обеспечивают возможность осуществления «самосборки» мельчайших структурных единиц вещества на атомном и молекулярном уровне при создании определённых физико-химических условий. В результате получают композиционные материалы с уникальными, заданными заранее свойствами, необходимыми для развития современной техники, медицины и других отраслей, позволяющие повысить жизненный уровень человека.

Объектами наших исследований являются: наноструктуры, полученные на разных стадиях процесса синтеза; металлические и оксидные наночастицы, самоорганизующиеся в полимерной матрице; наночастицы, изолированные друг от друга с помощью различных диспергирующих объектов и оболочек.

Основные методы исследования, которые мы применяем:

- 1) Рентгеноструктурный анализ с помощью рентгеновского дифрактометра PANalytical Empyrean с вертикально расположенным гониометром. Регистрация дифрактограмм производится с помощью быстродействующего детектора PIXcel3D. Дифрактометр снабжен большим пакетом программного обеспечения для расшифровки рентгенограмм.
- 2) Мессбауэровская спектроскопия в широком интервале температур: 80 – 900K
- 3) Сканирующая электронная микроскопия высокого разрешения. Исследование морфологии частиц проводится на сканирующем электронном микроскопе Quanta 3D FEG с катодом полевой эмиссии, позволяющим получать разрешение до 1.2 нм при ускоряющем напряжении 30 кВ.
- 4) Магнитные измерения полевых и температурных зависимостей намагниченности насыщения “in situ” непосредственно в реакторе синтеза (в лаборатории кафедры физической химии химического факультета МГУ).

В настоящее время в лаборатории ведутся работы по двум направлениям, по которым студентам 2 курса предлагаются следующие темы курсовых работ.

1. Получение железо-кобальтового нанокатализатора в порах силикогеля

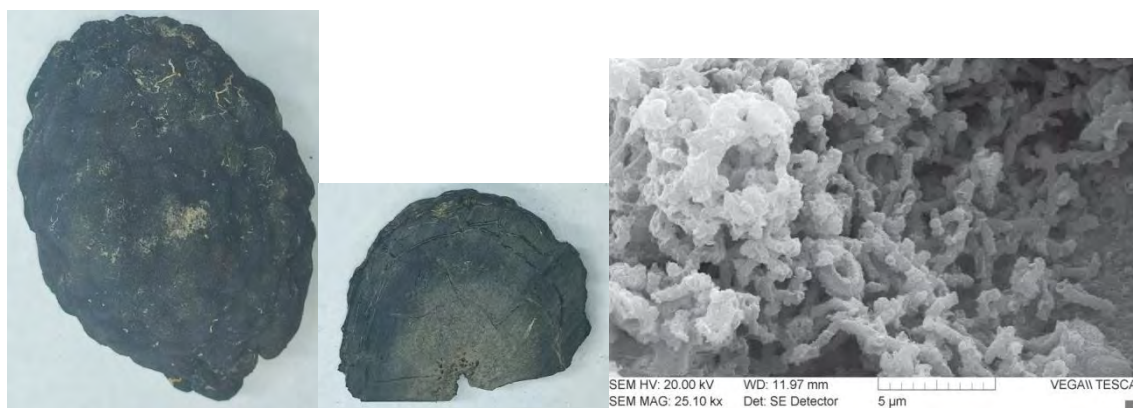
В данной работе исследуются структурные и магнитные характеристики нанокатализаторов системы Fe-Co, нанесенных на пористый носитель - силикагель. Процесс нанесения происходит в реакторе с постоянным воздействием внешних магнитных полей различной величины. В результате получают бимодальные нанокатализаторы на пористых структурах.



Экспериментальные установки, используемые в проводимых исследованиях

2. Изучение етального строения и бактериальной природы наноструктурных железо-марганцевых конкреций со дна Тихого океана.

Оксидные железомарганцевые руды Мирового Океана насыщены многими редко встречающимися на Земле элементами (например, кобальтом или редкоземельными металлами) и представляют очень большой интерес для промышленного освоения. Кроме того, их формирование является очень ярким примером природных нанотехнологий: их формирование и структурирование происходит в результате жизнедеятельности железо- и марганец-окисляющих бактерий. Эти бактерии используют в основном металлы, появившиеся на дне Океана в результате процессов подводного вулканизма.



Общий вид конкреции

Поперечный
шлиф

Микрофотография окаменелых нитчатых бактерий, создающих конкреции.

Материалом для исследования послужила коллекция образцов железо-марганцевых конкреций, специально собранная в рейсах российских научно-исследовательских судов в район Магеллановых гор Тихого океана.

Координаты для связи

Главный научный сотрудник, д.ф.-м.н. **Новакова Алла Андреевна**
(Дворовый корпус, тел. +7(495)-939-12-26; e-mail: novakova.alla@gmail.com)
<http://kftt.phys.msu.ru/index.php?id=44>

Синхротронные исследования конденсированных сред

Профессор, д.ф.-м.н. **Овчинникова Елена Николаевна**Профессор, д.ф.-м.н. **Орешко Алексей Павлович**Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н. **Акимова Ксения Андреевна**

Современная жизнь требует создания новых материалов, обладающих уникальными физическими свойствами (сверхпроводники, мультиферроики, материалы для спиновой электроники и др.). Чем же определяются эти свойства? Тем, из каких элементов состоит вещество, как в нем расположены атомы, как направлены атомные спины, т.е. структурой вещества. Традиционные методы исследования атомной и магнитной структуры – изучение дифракция рентгеновских лучей и нейтронов, источниками которых являются рентгеновская трубка и нейтронный реактор.

Однако существуют источники излучения, использование которых значительно расширяет возможности исследователей – это синхротроны. Синхротронное излучение (СИ) представляет собой электромагнитное излучение с широким спектром; оно очень яркое и при этом поляризованное. С его помощью можно увидеть не только, как расположены атомы в веществе, но и определить спиновый и орбитальный моменты атомов, увидеть колебания атомов, наблюдать фазовые переходы и многое другое, что необходимо для изучения новых материалов. Именно этим и занимается наша группа, развивая новые синхротронные методы исследования конденсированных сред и применяя их для изучения электронных, магнитных, фононных и других свойства кристаллических веществ.

На рисунках приведены результаты некоторых экспериментов, выполненных членами нашей научной группы.

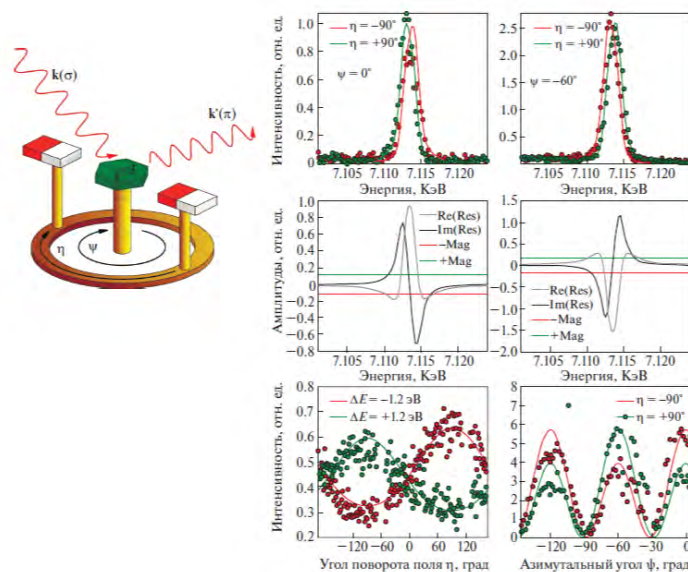


Рис.7. Определение знака взаимодействия Дзялошинского-Мории в борате железа FeBO_3 (Результаты опубликованы в журнале NATURE).

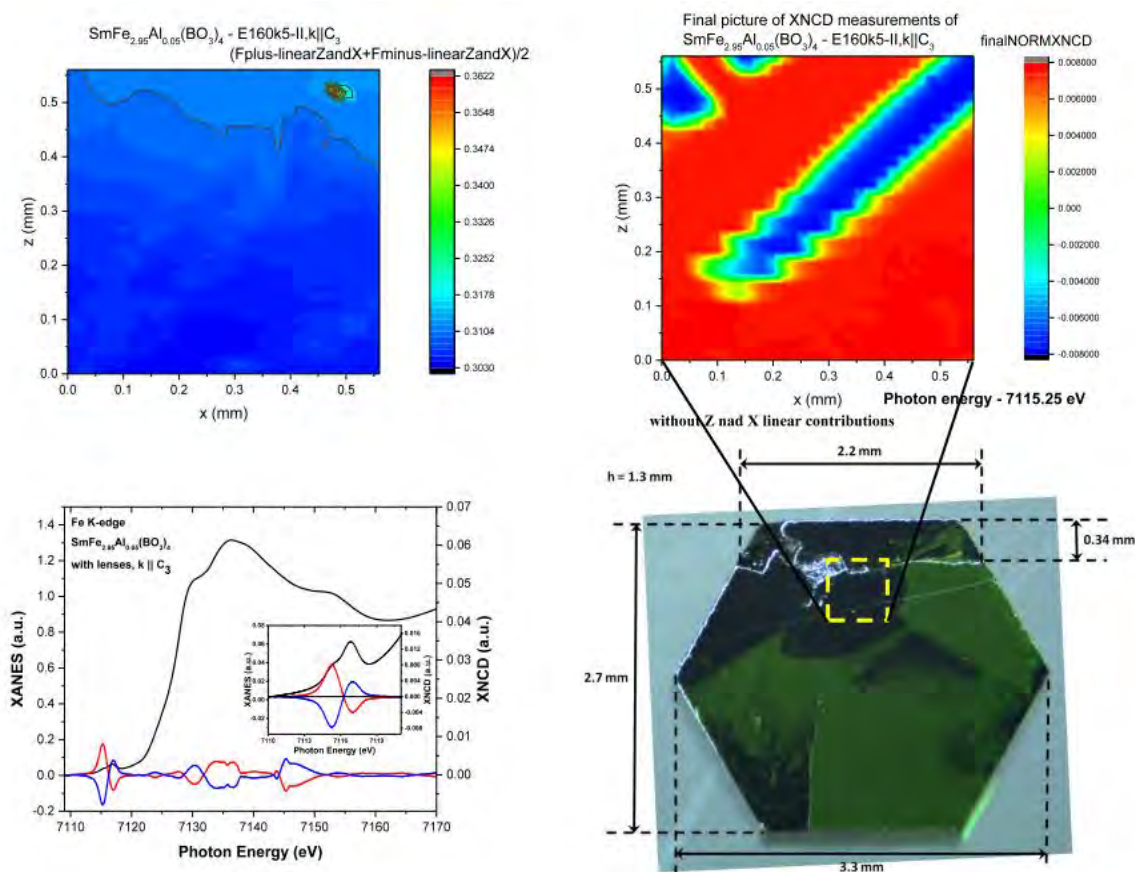


Рис.8. Распределение доменов правой (красный цвет) и левой (синий цвет) хиральности в мультиферроике $\text{SmFe}_{2.95}\text{Al}_{0.05}(\text{BO}_3)_4$ с помощью кругополяризованного синхротронного излучения (Работа опубликована в Journal of Synchrotron Radiation).

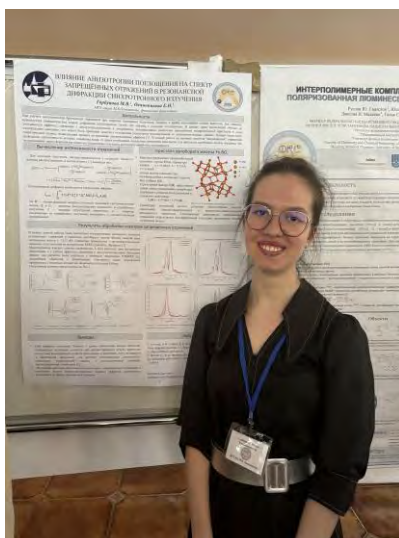
Какие у нас возможности для пользования синхротронами? Синхротроны – это центры коллективного пользования, в основном, международные, и поэтому их использование исследователями происходит в рамках научного сотрудничества. В мире существует более 50 источников СИ. В недалеком прошлом мы проводили экспериментальные сессии ESRF (Гренобль, Франция), DESY и XFEL (Гамбург, Германия). Сейчас мы проводим свои эксперименты в «КИСИ-Курчатов» (Москва). В будущем планируем работы на строящихся источниках «СКИФ» (Новосибирск) и «СИЛА» (Протвино).

В связи с созданием новых центров синхротронного излучения в России велика необходимость в специалистах, владеющих основами синхротронного эксперимента и теории. Свидетельством заинтересованности государства являются программы Министерства образования и науки РФ, предназначенные для развития синхротронных и нейтронных исследований, реализованные в 2020-2024 гг. В рамках выполнения этих программы были проведены школы, конференции для молодых ученых, прочитаны курсы лекций. Обучение прошли сотни научных сотрудников, которые будут в дальнейшем востребованы для работы на новых источниках СИ, построенных в России.

Мы ждем тех, кто желает в будущем стать специалистом в области использования СИ для исследования конденсированных сред.



Е.Н.Овчинникова с коллегами из Института кристаллографии, НИЦ «Курчатовский институт», Технического университета г. Фрайберга (Германия) и центра синхротронного излучения DSEY (Германия), Москва, 2020 г.



Студентка 515 группы Мария Горбунова на Молодежной Школе по физике конденсированного состояния (Школа ФКС-2025), март 2025 года

Примерные темы работ для студентов 2-го курса:

- 1) Симметрия в науке и искусстве (обзор, расчёты)
- 2) Синхротронное излучение: свойства и применение (обзор)
- 3) Расчет спектров поглощения поляризованного рентгеновского излучения (на примере конкретной структуры) (теория, расчёты)
- 4) Цифровые двойники рентгеновской оптики (теория, обзор)
- 5) Устойчивость изделий микроэлектроники к ионизирующим излучениям (теория, расчёты)

Координаты для связи

Профессор, д.ф.-м.н. **Овчинникова Елена Николаевна**
(Комн. 1-25, +7(963)-680-17-74; e-mail: ovtchin@gmail.com)
<http://kfft.phys.msu.ru/index.php?id=34>

Дифракция и диффузное рассеяние рентгеновских лучей в многослойных наноструктурах

Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н. **Прудников Илья Рудольфович**



Многослойные наноструктуры – это последовательность различных по толщине тонких (с толщиной от нескольких до нескольких десятков нанометров) пленок из различных материалов, которые располагаются непосредственно друг за другом. Такие наноструктуры создаются при помощи современных нанотехнологий. Многослойные наноструктуры широко используются в современных опто- и микроэлектронике, в фотонике. Информация об их строении очень интересна с точки зрения физики. Она дает возможность понять, как идет процесс роста таких многослойных пленок.

Экспериментальное исследование строения многослойных наноструктур осуществляется при помощи наблюдения дифракции и диффузного рассеяния рентгеновских лучей на этих объектах. Результаты обработки и анализа экспериментальных данных позволяют судить о том, насколько применяемая нанотехнология эффективна для создания той или иной наноструктуры.

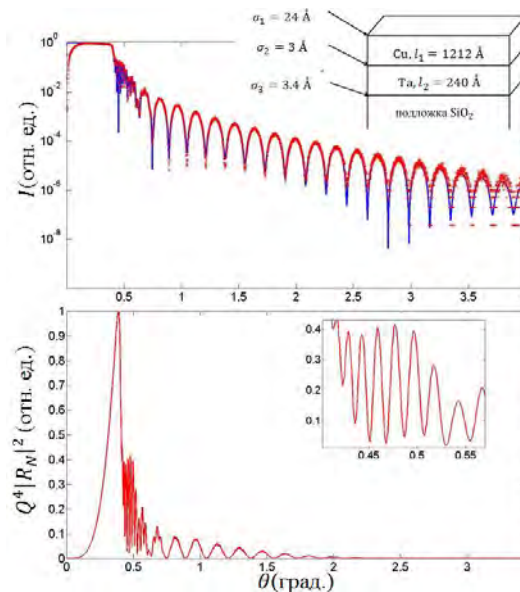


Рис.9. Экспериментальная (красная) и теоретическая (синяя) кривые зеркального отражения рентгеновского излучения ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$) от многослойной пленки Cu/Ta/SiO_2 (подложка) (многослойная пленка изображена на вставке, где l_j – толщина j -го слоя, σ_j – среднеквадратичная высота шероховатости на границе между слоями).

В нашей научной группе, на основе теоретических расчетов, мы разрабатываем программное обеспечение, которое используется для обработки экспериментальных кривых дифракционного отражения и диффузного рассеяния рентгеновских лучей в

различных многослойных пленках. Эти программы дают нам возможность решить обратную задачу рентгеновской дифрактометрии или рефлектометрии и получить из экспериментальных данных количественную информацию о строении многослойных пленок, а именно, информацию о толщинах отдельных слоев, плотностях материалов слоев, среднеквадратичной высоте шероховатостей границ разделов между слоями и др. Для решения обратной задачи необходимо сначала решить прямую задачу и рассчитать кривые дифракционного отражения и диффузного рассеяния рентгеновских лучей в зависимости от структурных параметров многослойных наноструктур. Для решения прямой задачи в нашей научной группе также разрабатывается программное обеспечение и проводится численное и теоретическое моделирование дифракции и диффузного рассеяния рентгеновских лучей в различных многослойных периодических и непериодических пленках.

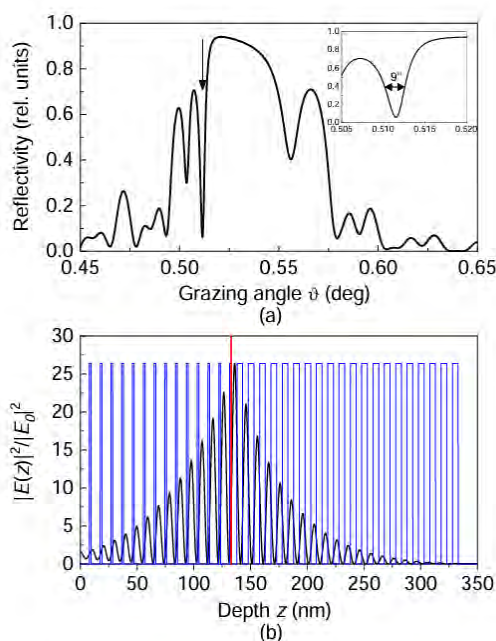


Рис.10. Результаты численного моделирования рентгеновской поверхностной волновой моды на границе раздела между двумя периодическими многослойными структурами при зеркальном отражении от этих структур (граница раздела показана красной вертикальной линией).

Примерные темы работ для студентов 2-го курса:

- 1) Традиционное преобразование Фурье и вейвлет анализ: преимущества использования вейвлет-преобразования для количественной и качественной интерпретации данных современных физических экспериментов
- 2) Современные наноразмерные сверхрешётки и дифракция рентгеновских лучей: рентгеновские дифракционные методы исследования сверхрешёток.

Координаты для связи

Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н. **Прудников Илья Рудольфович**

(к.1-46, тел. +7(495)-939-23-87; e-mail: i_prudnikov@yahoo.com)

<http://kfft.phys.msu.ru/index.php?id=60>

Исследование квантовых свойств магнитных наноструктур методами компьютерного моделирования

Доцент, к.ф.-м.н. Бажанов Дмитрий Игоревич



Исследования последних лет в области изучения физических свойств атомных кластеров и отдельных молекул приобрели огромную важность. С научной точки зрения наноструктуры, состоящие из отдельных атомов или молекул, представляют собой уникальный класс объектов, изучение свойств которых позволяет понять многие явления, связанные с переходом от изолированного атома к многоатомным системам. С другой стороны, изучение свойств наноструктур предоставляет в перспективе возможности для практической реализации важнейших технологических изменений в области нано- и микроэлектроники: это создание в ближайшем будущем компактных магнитных накопителей информации, а также быстрых миниатюрных устройств для цифровой логики и квантовых вычислений.

При помощи современных экспериментально-технических средств в настоящее время можно создавать на подложках наноструктуры определенных размеров и форм, с заданной плотностью расположения атомов с необходимой степенью их порядка. Процесс создания таких структур может регулироваться как искусственным методом контролируемой диффузионной агрегации, так и естественными процессами самоорганизации.

Подобные структуры интересны как объекты для теоретического изучения атомной структуры, электронных и магнитных свойств низкоразмерных систем. Однако подобные исследования чрезвычайно сложны и требуют теоретических подходов, основанных на первопринципных (*ab initio*) и полуэмпирических расчетах, сопряженных с компьютерным экспериментом. В последнее время большие достижения в области компьютерного эксперимента были достигнуты с применением мощных вычислительных комплексов, ведущих расчеты с использованием параллельных вычислений (MPI/OpenMP). Эти комплексы позволили перейти к использованию сложных теоретических моделей для описания реального межатомного взаимодействия структур низкой размерности. Усложнение расчетных моделей дало возможность более тонко, на уровне отдельных атомов, исследовать квантовую природу рассматриваемых явлений (спиновую поляризацию атомов, ориентацию атомных спинов, обменное взаимодействие, «квантовое запутывание» и нелокальные спиновые корреляции при создании кубитов для квантовых вычислений и передачи информации, и др.).

В нашей научной группе ведутся теоретические исследования квантовых свойств магнитных наноструктур. Для этого используются теория функционала электронной плотности, метод псевдопотенциалов, первопринципная молекулярная динамика, спиновая динамика в рамках квантового гамильтониана Гейзенберга.

Для проведения расчетов применяются вычислительные комплексы WIEN2k, VASP, Quantum ESPRESSO, CASTEP, SMEAGOL, VAMPIRE, SPINUS, LAMMPS, COMSOL, QuantumATK и другие, разработанные в ведущих европейских теоретических лабораториях и установленные в высокопроизводительных вычислительных центрах МГУ и РАН.

Благодаря собственным разработкам и научным связям нашего коллектива студенты нашей лаборатории участвуют в совместных проектах с различными ведущими российскими и зарубежными научными лабораториями (Германии, Швейцарии, Швеции, Испании, Китая, Кореи и др.) с перспективой получения там позиций аспирантов и постдоков.

Темы курсовых работ для студентов 2 курса (доцент, **Бажанов Д.И.**)

- 1) Исследование атомной структуры и магнитных свойств наноструктур на металлических и диэлектрических поверхностях методом первопринципной молекулярной динамики с применением теории функционала плотности и высокопроизводительных вычислений на суперкомпьютерах
- 2) Исследование динамики переключения атомных спинов магнитных наноструктур в рамках обобщенного спинового гамильтониана с применением системы компьютерной алгебры
- 3) Исследование возникновения квантового запутывания и квантового возрождения в процессе динамики атомных спинов квантовых цепочек.
- 4) Поиск точных представлений о распределении внутренних корреляций динамически запутанных спинов квантовой системы с применением искусственных нейронных сетей
- 5) Поиск точных решений квантового спинового гамильтониана с помощью различных алгоритмов машинного обучения искусственных нейронных сетей

Координаты для связи

Доцент, к.ф.-м.н. **Бажанов Дмитрий Игоревич**

(к. 3-47, тел.: +7(495)-939-46-10; e-mail: dima@kintechlabs.com)

<http://kfft.phys.msu.ru/index.php?id=55>

Фундаментальные и функциональные свойства редкоземельных металлов, их сплавов и соединений

Ведущий научный сотрудник, д.ф.-м.н. **Терёшина Ирина Семёновна**



Редкоземельные металлы представляют большой практический интерес, поскольку на их основе возможна разработка новых многофункциональных материалов. Эти материалы могут использоваться в системах магнитного охлаждения, магнитомеханических устройствах, сенсорах и датчиках температуры, перемещений и других физических величин. Перспективность применения редкоземельных металлов связана с тем, что магнитные фазовые переходы в них сопровождаются рядом интересных с точки зрения практического использования эффектов (магнитострикционным, магнитокалорическим, эластокалорическим и др.).

Наиболее интересными с практической точки зрения являются соединения и сплавы редкоземельных элементов с элементами подгруппы железа. Тут необходимо, прежде всего, отметить материалы, применяемые для создания постоянных магнитов, область применения которых в технике просто не имеет границ – она простирается от простейших механизмов до космических аппаратов. Поэтому особое внимание уделяется как поиску новых недорогих материалов для постоянных магнитов, так и созданию на основе уже известных материалов магнитов с заданным комплексом функциональных свойств.

Целенаправленное изменение структурного состояния сплавов – от моно- до нанокристаллического – позволяет варьировать свойства получаемых материалов в достаточно широких пределах. Исследования по схеме «состав – структура – дисперсность – свойства» приобрела в настоящее время огромное и важное значение. Провести сравнительные исследования свойств (механических, электрических, магнитных, магнитотепловых, магнитоупругих и др.) для материалов в различном структурном состоянии – важная научно-исследовательская задача, которая по плечу студентам физического факультета.

Кроме того, известно, что редкоземельные металлы и их сплавы легко поглощают водород, азот, кислород и другие газообразующие примеси, которые могут кардинальным образом изменять свойства металлов и сплавов. Комплексные исследования влияния газообразующих примесей на свойства материалов в различном структурном состоянии проводятся редко. Наша научная группа ставит своей основной задачей восполнить данный пробел в физике конденсированного состояния и в материаловедении и выполнить подобные исследования для наиболее перспективных материалов, каковыми являются редкоземельные металлы, сплавы и соединения на их основе.



Лабораторное
оборудование

Примерные темы работ для студентов 2-го курса:

- 1) Магнитные материалы для водородной энергетики (подготовить обзор, составить таблицу).
- 2) Материалы для постоянных магнитов (подготовить обзор, составить таблицу).
- 3) Магнитокалорические материалы для магнитного охлаждения (подготовить обзор, составить таблицу).
- 4) Магнитострикционные материалы для датчиков и сенсоров (подготовить обзор, составить таблицу)
- 5) Многофункциональные приборы для измерения физических свойств (подготовить обзор, составить таблицу существующих приборов).

Координаты для связи

Ведущий научный сотрудник, д.ф.-м.н. **Терёшина Ирина Семёновна**
(к. 1-26. Тел. 939-42-43, e-mail: irina_tereshina@mail.ru, tereshina@physics.msu.ru)
<http://kfft.phys.msu.ru/index.php?id=50>

Прецизионные исследования структурно – фазового состояния металлических систем

Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н. **Акимова Ольга Владимировна**



Современному развитию природоподобных наукоемких технологий требуется миниатюризация рабочих устройств. Разработка подобных устройств невозможна без управления процессами самосборки и роста широкого спектра функциональных металлических сплавов. В свою очередь, управление такими процессами невозможно без понимания вызывающих их физических процессов.

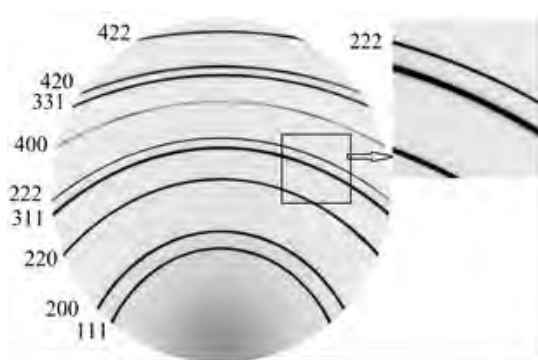
В нашей группе проводится изучение влияния трансформации кристаллической решетки на функциональные свойства металлических систем и сплавов на основе палладия, широко применяющихся в аэрокосмической промышленности, автомобильной индустрии, микроэлектронике, фармакологии и ин-

дустрии контактов.

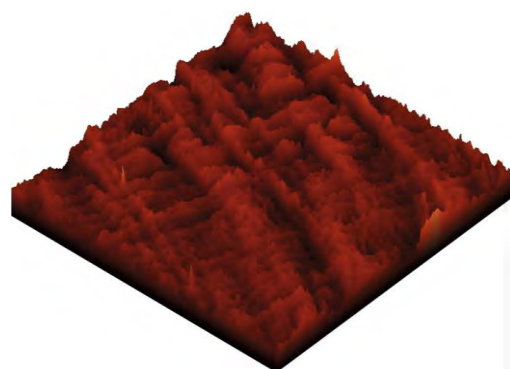
Работа проводится в двух направлениях:

(а) рентгеноструктурные исследования материалов на Курчатовском источнике синхротронного излучения

(б) исследование морфологии поверхности металлических систем методами атомно-силовой микроскопии (рис. 11) и сканирующей электронной микроскопии высокого разрешения.



(а)



(б)

Рис. 11. (а)-дифрактограмма, снятая с металлического образца на синхротронном излучении источника Курчатовского научного исследовательского центра, (б)-топология поверхности металлической катанной ленты, определенная методом атомно-силовой микроскопии на зондовом микроскопе Смена (МГУ, центр коллективного пользования).

Примерные темы работ для студентов 2-го курса:

- 1) Особенности структурно-фазового состояния твердых растворов металлических систем
- 2) Определение глубины формирования отражения при рассеянии рентгеновских лучей оптически непрозрачным объектом
- 3) Процессы самосборки атомов в твердых телах-что известно к настоящему моменту

Координаты для связи

Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н. **Акимова Ольга Владимировна**

(к. 3-47, тел.: +7(495)-939-46-10; e-mail: akimova@physics.msu.ru)

<http://kfft.phys.msu.ru/index.php?id=51>

Экспериментальные методы исследования взаимосвязи структуры и свойств композиционных материалов

Доцент, д.ф.-м.н. **Киселёва Татьяна Юрьевна**

Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н. **Якута Екатерина Валерьевна**



Последние десятилетия связаны с развитием направленного синтеза и дизайна новых функциональных материалов и создания приборов на их основе. Под термином «функциональные материалы» понимают широкий класс веществ, свойства которых организуют и конструируют таким образом, чтобы они могли удовлетворить конкретному назначению (исполняемой функции) контролируемым способом. Характерным представителем класса функциональных материалов являются композиты – материалы, состоящие из двух или более компонентов, различающихся по своему химическому составу, размерам, разделенных выраженными границами раздела. Композиты обладают свойствами, отличными от составляющих их элементов; при этом их состав, структура и функциональность могут быть «запроектированы» заранее. В

материаловедении функциональных материалов композиционные материалы находят свое применение для формирования специальных покрытий для защиты от излучений, коррозии, механических повреждений, для формирования порошковых биополимерных композиционных частиц для диагностической визуализации и магнитотермии патологических клеток, для создания материалов для интеллектуальных устройств, сенсоров, систем позиционирования.

Мы ведем научно-исследовательскую работу в сотрудничестве с коллегами из Института химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск), Физико-технического Института имени Иоффе (г. Санкт-Петербург) Мы участвуем в международном сотрудничестве с учеными Института объединенного машиностроения Национальной Академии наук Беларуси (г. Минск) и Института физики и технологии Монгольской Академии наук (г. Улан-Батор, Монголия).



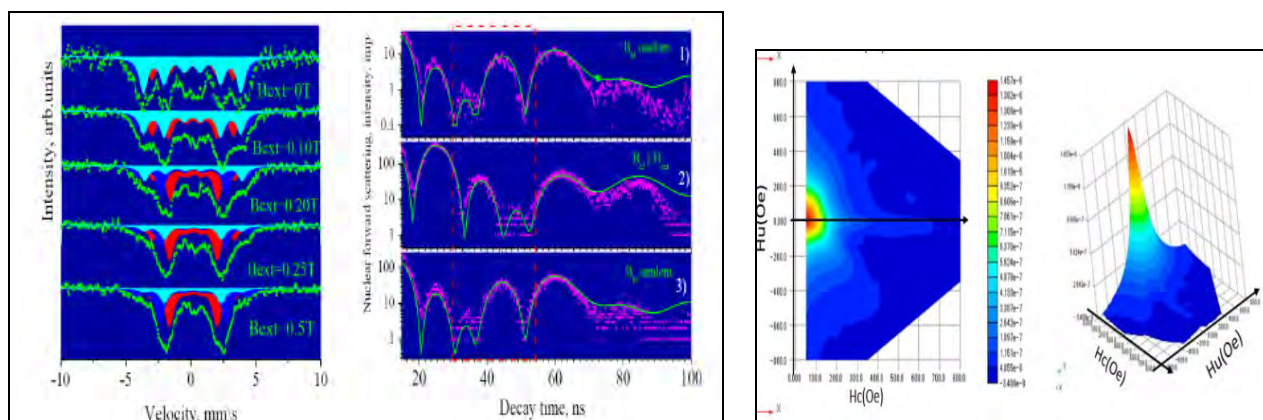
Т. Ю. Киселёва в МГУ с академиком Монгольской Академии Наук Д. Сангаа

Экспериментально изучаются субмикронные и нано-частицы оксидов и соединений железа разной морфологии и содержащие их композиционные системы. Образцы синтезируются в условиях интенсивной механической активации, химического синтеза в растворах, а также формируются из порошковых прекурсоров посредством компактирования, самораспространяющегося синтеза, газотермического напыления и горячего прессования в объемные функциональные материалы. Исследуются закономерности формирования структуры и свойств материалов, выявляется природа физико-химических процессов, протекающих как на технологических этапах создания материалов, так и в реальных условиях их эксплуатации. Изучается стабильность структуры к воздействию температур, механических и радиационных воздействий, поведение материала во внешнем магнитном поле.

Композиционные материалы, содержащие наноструктурные элементы, являются довольно сложным объектом для экспериментальных исследований. Поэтому при их изучении требуется комплексный подход, сочетающий применение нескольких экспериментальных методов, таких как рентгеновская дифракция, мёссбауэровская гамма-резонансная спектроскопия, спектроскопия комбинационного рассеяния, дифференциальная сканирующая калориметрия, магнитометрия, сканирующая и просвечивающая электронная микроскопия.

Студенты нашей научной группы имеют уникальную возможность научиться работать на новейшем научном оборудовании последнего поколения, которое установлено в лаборатории кафедры в рамках Программы развития Московского университета. Это рентгеновский дифрактометр Empyrean Panalytical, мёссбауэровский гамма-резонансный спектрометр MS1104, комплекс для термоаналитических исследований, включающий Дифференциальный сканирующий калориметр DSC8000, совмещенный с оптоволоконным рамановским спектрометром RamanFlex400, а также Динамический механический анализатор DMA 8000 Perkin Elmer.

Мы также имеем опыт работы с использованием синхротронного источника. В 2018 году нами были проведены исследования функциональных металло-полимерных композиционных материалов с большим магнито-деформационным эффектом на станции ядерно-резонансного рассеяния европейского синхротронного центра ESRF в Гренобле (Франция).



Мёссбауэровские спектры во внешнем магнитном поле частиц магнитострикционного сплава

Галфенол (слева) и спектры на временной шкале частиц сплава Галфенол в полимерном композите при разных направлениях между направлением внешнего магнитного поля и поля на ядрах ^{57}Fe в частицах (средняя панель), FORC-диаграмма перемагничивания для частиц,

демонстрирующая их магнитное доменное состояние (справа).



Доцент Т. Ю. Киселева, научный сотрудник лаборатории рентгеноструктурных методов Анализа ТИСНУМ, выпускник кафедры физики твердого тела к. ф-м. н. С. И. Жолудев (в центре) и магистрант кафедры В. М. Кабанов во время эксперимента на станции ID18 Европейского синхротронного центра ESRF в Гренобле.

Татьяна Юрьевна ведет научную работу на кафедре физики твердого тела с 1993 года. Лауреат стипендиальной программы Московского Университета для молодых ученых (2007 год) за цикл работ по исследованию наноструктурных композитных систем. В 2017 году защитила диссертацию на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Т. Ю. Киселева – член диссертационных советов Московского Государственного Университета и Тверского Государственного Университета, председатель комиссии по выпускным работам магистров и аспирантов в Тверском Государственном Университете.

Читает для студентов кафедры авторские специальные курсы «Ядерно-резонансная спектроскопия», «Мессбауэровская спектроскопия в физическом материаловедении», «Физические методы исследования структуры и свойств материалов». Является автором ряда учебно-методических пособий для студентов и аспирантов кафедры, соавтором практикума по мессбауэровской спектроскопии и инженерной физике.

Под руководством Т. Ю. Киселевой защищено 18 дипломных (выпускных) работ, автор одной из них отмечен дипломом лауреата 2-й степени на конкурсе научных студенческих работ имени Р. В. Хохлова. Несколько выпускников, проходивших обучение в научной группе, продолжают вести исследования в ведущих научно-исследовательских институтах России и Евросоюза, работают в высокотехнологичных компаниях.

Примерные темы работ для студентов 2-го курса:

- 1) Совмещенные методы анализа структуры и свойств функциональных материалов – востребованный тренд в научном оборудовании.
- 2) Структурные и размерные эффекты частиц ферритов и композитов для магнитотермии
- 3) Оксиды железа и их композиты в современных биомедицинских технологиях.

- 4) Полиэлектролиты – эффективное оружие в борьбе против вирусов.
- 5) Рентгеноструктурный анализ белков (обзор).
- 6) Влияние постоянного магнитного поля на механические характеристики полимерных композиционных материалов с внедрёнными магнитными частицами.

Координаты для связи

Доцент, д.ф.-м.н. **Киселёва Татьяна Юрьевна**

(Дворовый корпус, тел. +7(495)-939-12-26; e-mail: kiseleva.tyu@gmail.com)

<http://kfft.phys.msu.ru/index.php?id=52>

Лаборатория физического металловедения

Профессор, д.ф.-м.н. Хунджуа Андрей Георгиевич

Доцент, к.ф.-м.н. Бровкина Елена Анатольевна



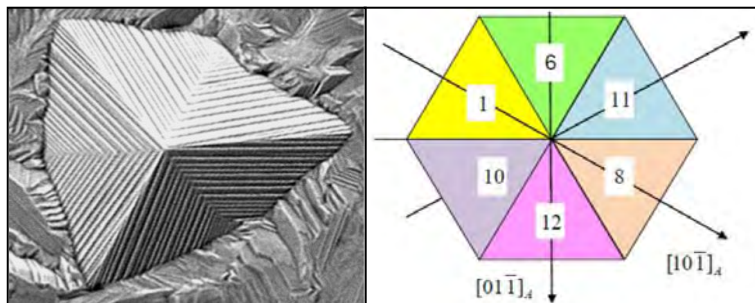
Одним из важнейших в области физического металловедения второй половины XX в. признано открытие термоупругих мартенситных превращений и эффекта памяти формы (термоупругие мартенситные превращения были открыты в нашей стране в группе академика Г.В. Курдюмова). Мартенситное превращение – бездиффузионное фазовое превращение I рода, протекающее по сдвиговому механизму в процессе охлаждения образца как результат потери устойчивости кристаллической решетки высокотемпературной фазы (аустенита).

Мартенситное превращение при охлаждении в отсутствии внешних напряжений формирует кристаллы мартенсита с вполне определённой внешней огранкой и внутренним строением.

Деформация, присущая мартенситному превращению, заложена в деформации элементарной ячейки и выражается в изменении макроскопической формы монокристалла исходной фазы аустенита.

Внутреннее строение кристаллов мартенсита обусловлено их двойникованием в процессе роста. Нередко проявляется тенденция к группировке мартенситных кристаллов в самоаккомодационные комплексы (СК) – системы доменов мартенситных кристаллов, разделенных (и в тоже время связанных) плоскостями двойникования (двойникование – распространенное явление зеркального отражения решетки относительно одной из кристаллографических плоскостей).

Строение СК определяется числом входящих в него доменов и конфигурацией междоменных границ, т.е. задействованными плоскостями двойникования. Причиной формирования комплексов является самоаккомодация упругих напряжений, компенсирующая деформацию формы комплекса в целом.



Изображение СК, полученное методом электронной микроскопии по литературным данным и схема строения шестидоменного самоаккомодационного комплекса кристаллов мартенсита в никелиде титана.

К задачам, которыми мы занимаемся, примыкают и более общие вопросы.

Прежде всего, вопрос о сопряжении анизотропных структур, которое имеет место при всех - мартенситных превращениях в силу существования так называемой габитусной плоскости, по которой сопрягаются кристаллическая решетка исходной фазы (аустенита) и продукта превращения (мартенсита). Индексы габитусной плоскости и само ориентационное соотношение между решетками двух фаз, скорее всего, можно рассчитать, исходя только из параметров элементарных ячеек аустенита и мартенсита. Вопрос, каким образом реализовать эту идею в общем виде, является ключевым в феноменологической теории фазовых превращений и остается открытым уже более 100 лет.

Кроме того, нами были обнаружены структурные изменения при естественном старении (т.е. при комнатной температуре) сплавов на основе никелида титана TiNi. Это практически очень важно, т.к. именно этот материал применяется в медицине кровеносных сосудов и протезировании. Если изделия из никелида титана будут менять свои свойства в течение нескольких лет после вживления в организм, то нежелательные и даже трагические последствия неизбежны.

*Ждем студентов, желающих заниматься реальным экспериментом! Любовь к формулам и программированию также приветствуется.
Студенты 3-го курса сразу после распределения
имеют возможность включиться в работу.*

Координаты для связи

Профессор, д.ф.-м.н. Хунджуа Андрей Георгиевич
(к.1-22, тел. +7(495)-939-23-87 e-mail: khundjua@mail.ru)
<http://kfft.phys.msu.ru/index.php?id=46>