

Цикл наукових робіт на здобуття Державної премії України в галузі науки і техніки за 2015 рік

## «Функціональні властивості об'ємних і поверхневих впорядкованих систем та створення нових металовмісних матеріалів і структур»

### АВТОРСЬКИЙ КОЛЕКТИВ

1. **Гомонай** Олена Василівна, д.ф.-м.н., доц., **НТУУ «КПІ», Київ**
2. **Гречнєв** Геннадій Євгенович, д.ф.-м.н., ст.н.с., **ФТІНТ НАНУ, Харків**
3. **Звягін** Андрій Анатолійович, д.ф.-м.н., проф., **ФТІНТ НАНУ, Харків**
4. **Карбівський** Володимир Леонідович, д.ф.-м.н., проф., **ІМФ НАНУ, Київ**
5. **Колесніченко** Юрій Олексійович, д.ф.-м.н., проф., **ФТІНТ НАНУ, Харків**
6. **Кордюк** Олександр Анатолійович, д.ф.-м.н., чл.-кор. НАНУ, **ІМФ НАНУ, Київ**
7. **Марченко** Олександр Анатолійович, д.ф.-м.н., чл.-кор. НАНУ, **ІФ НАНУ, Київ**
8. **Надутов** Володимир Михайлович, д.ф.-м.н., проф., **ІМФ НАНУ, Київ**
9. **Найдюк** Юрій Георгійович, д.ф.-м.н., проф., **ФТІНТ НАНУ, Харків**
10. **Татаренко** Валентин Андрійович, д.ф.-м.н., проф., **ІМФ НАНУ, Київ**

# АНОТАЦІЯ

В циклі робіт проведено експериментальні та теоретичні дослідження електронних, магнітних, структурних характеристик об'ємних і поверхневих впорядкованих систем. Виявлено низку нових ефектів, що містять фундаментальну інформацію щодо процесів і механізмів електронного, магнітного, атомного впорядкування та молекулярної самоорганізації. Встановлено зв'язок між електронною зонною структурою, магнітною, атомною структурами та фізичними властивостями складних металовмісних сполук і штучних систем, що мають перспективу бути функціональними матеріалами. Запропоновано методи цілеспрямованої зміни фізичних параметрів (електропровідності, магнітної сприйнятливості, механічних властивостей тощо) та застосування досліджених систем в електроніці, спінтроніці, сенсоріці, біотехнологіях і точному приладобудуванні.

Результати досліджень викладено у **183** публікаціях, в тому числі в 6 монографіях, 1 главі в монографії, 176 статтях у реферованих журналах, таких як *Nature*, *Nature Physics*, *JACS*, *Langmuir*, *Phys. Rev. Lett.*, *Phys. Rev. B*, *ФНТ*...

Роботи авторів процитовано в більш ніж 160 наукових журналах загальний індекс цитування публікацій складає **4111** (згідно бази даних SCOPUS); h-індекс = **35**. За даною тематикою захищено 9 докторських та 25 кандидатських дисертації.

**Метою** даного циклу робіт було з'ясувати механізми формування та взаємного впливу різних типів впорядкування в об'ємі та на поверхні металовмісних матеріалів для цілеспрямованого керування їх функціональними властивостями та для подальшого застосування в електроніці, спінтроніці, сенсориці та біотехнологіях.

Ця проблема виявилася суттєво комплексною: для виявлення загальних механізмів впорядкування необхідно було дослідити різні типи впорядкувань різними представленими в Україні найсучаснішими експериментальними та теоретичними методами та, виявивши відомі функціонально значущі типи впорядкувань, виділити низку перспективних застосувань в різних галузях фізики твердого тіла.

З часу попереднього представлення розвиток циклу робіт полягав у підтвердженні встановлених механізмів формування і взаємного впливу різних типів впорядкувань та в їх застосуванні до цілеспрямованого керування функціональними властивостями металовмісних матеріалів.

### **Напрями виконаних досліджень**

Електронні властивості (*Гомонай, Гречнєв, Звягін, Колесніченко, Кордюк, Найдюк*)

Магнетизм (*Гомонай, Гречнєв, Звягін, Колесніченко, Кордюк, Надутов, Найдюк, Татаренко*)

Структура (*Гречнєв, Карбівський, Марченко, Надутов, Татаренко*)

## Основні фундаментальні результати роботи

Виявлено причини і механізми зарядового (*Звягін, Кордюк, Найдюк, Гречнєв, Колесніченко*), спінового (*Звягін, Кордюк, Найдюк, Гречнєв, Гомонай, Колесніченко, Надутов, Татаренко*) й атомного (*Карбівський, Надутов, Татаренко*) впорядкувань та молекулярної самоорганізації (*Карбівський, Марченко*) у структурах з конкуруючими типами порядків та встановлено їх зв'язок з електронною зонною структурою (*Кордюк, Гречнєв, Карбівський*).

Виділено магніто-електронні та конфігураційно-розмірні ефекти, що визначають зазначені механізми та уможливають керування функціональними властивостями цих структур, а саме: ефекти електрон-спінової (*Звягін, Кордюк*) та магнітно-пружної взаємодії (*Звягін, Гомонай, Татаренко*), надтонкої взаємодії (*Надутов*), механізми передачі спінового й обертального моментів (*Найдюк*), хімічного зв'язку (*Гречнєв*), квантові механізми впорядкування електронів (*Колесніченко*), конфігураційно-розмірні ефекти (*Карбівський, Татаренко*) та ефекти сумірності (*Кордюк, Марченко*).

## Практична значимість роботи.

Показано, що визначені ключові взаємодії та нові ефекти створюють основу для застосування зазначених структур в мікро- (*Кордюк, Найдюк, Колесніченко*) та молекулярній електроніці (*Марченко*), спінтроніці (*Звягін, Гречнєв, Гомонай*), сенсоріці (*Карбівський, Марченко*) та біотехнологіях (*Карбівський*), точному приладобудуванні (*Марченко, Надутов, Татаренко*). Зокрема, реалізовано спіновий діод на основі подвійного тунельного переходу із мультишаруватої структури залізо–оксид магнію (*Найдюк*), одержано високовпорядковані моношарові плівки з керованими поверхневими властивостями (*Марченко*), запропоновано матеріали для ефективного видалення радіонуклідів з водних розчинів та їх довгострокового захоронення (*Карбівський*).

# ЕЛЕКТРОННЕ ВПОРЯДКУВАННЯ, ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА ТА ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ

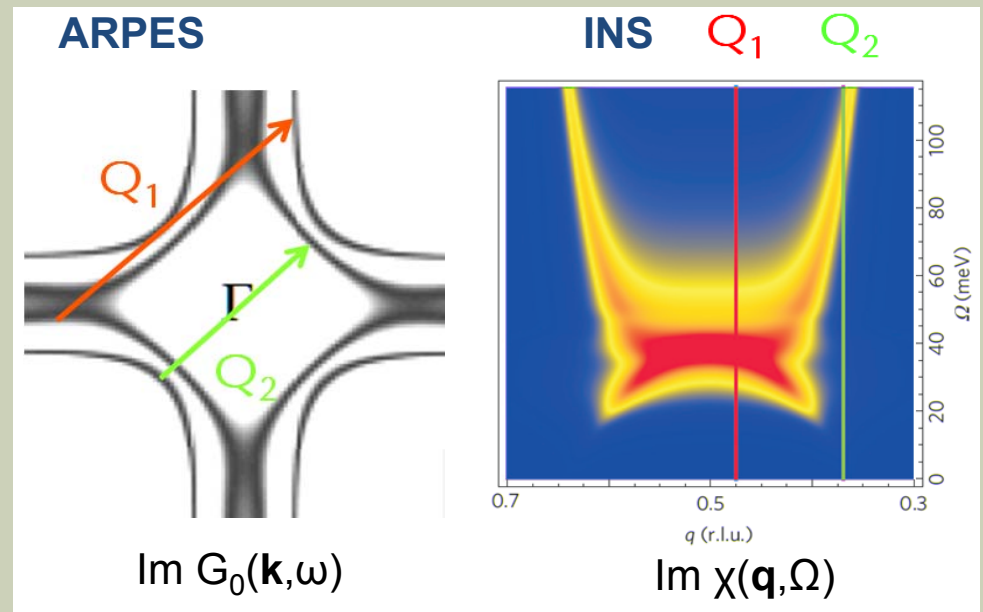
О. А. Кордюк (ІМФ НАН України)

Експериментально доведено ключову роль електронної структури (геометрії поверхні Фермі) у формуванні різних типів впорядкування у квазідвовимірних металах, зокрема, спінового впорядкування та надпровідного спарювання у надпровідних купратах та надпровідниках на основі заліза, зарядового впорядкування у дихалькогенідах перехідних металів та орбітального впорядкування в манганатах; виявлено зв'язок особливостей електронного спектру, таких як псевдощілина, з ефектами співрозмірності конкуруючих порядків.

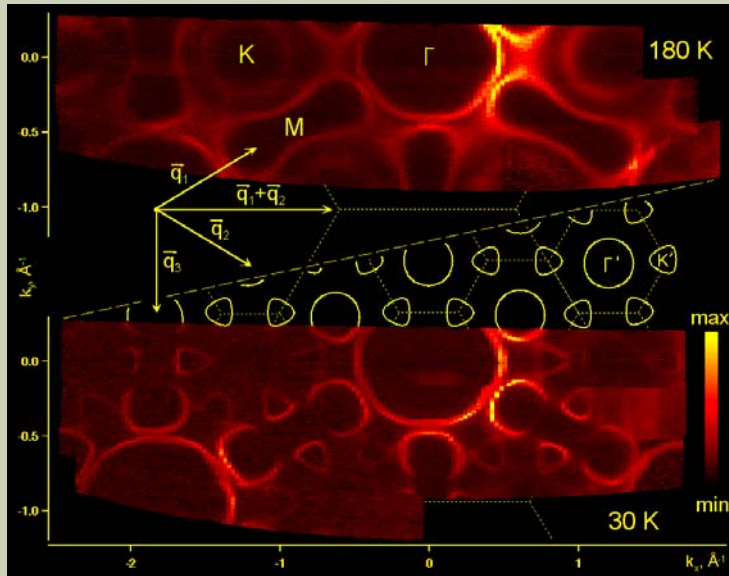
## Спінове впорядкування та надпровідне спарювання у ВТНП

Шляхом порівняння ARPES та нейтронних (INS) спектрів показано, що основною причиною ренормалізації в купратах є взаємодія електронів зі спіновими флуктуаціями, спектр яких визначається сприйнятливістю електронів провідності.

A. A. Kordyuk et al., *PRL* **97**, 017002 (2006)  
T. Dahm et al., *Nature Phys* **5**, 217 (2009)  
A. A. Kordyuk et al., *EPJ ST* **188**, 153 (2010)



## Роль поверхні Фермі у формуванні електронних впорядкувань



Показано, що псевдощільина як у дихалькогенідах перехідних металів так і у ВТНП-купратах має схожу природу та є результатом неспіврозмірного електронного впорядкування (зарядового у дихалькогенідах та спінового у купратах), що, у свою чергу, є наслідком “нестингу” поверхні Фермі.

A. A. Kordyuk et al., *PRB* **66**, 014502 (2002)

A. A. Kordyuk et al., *PRB* **67**, 064504 (2003)

S. V. Borisenko et al., *PRL* **100**, 196402 (2008)

A. A. Kordyuk et al., *PRB* **79**, 020504 (2009)

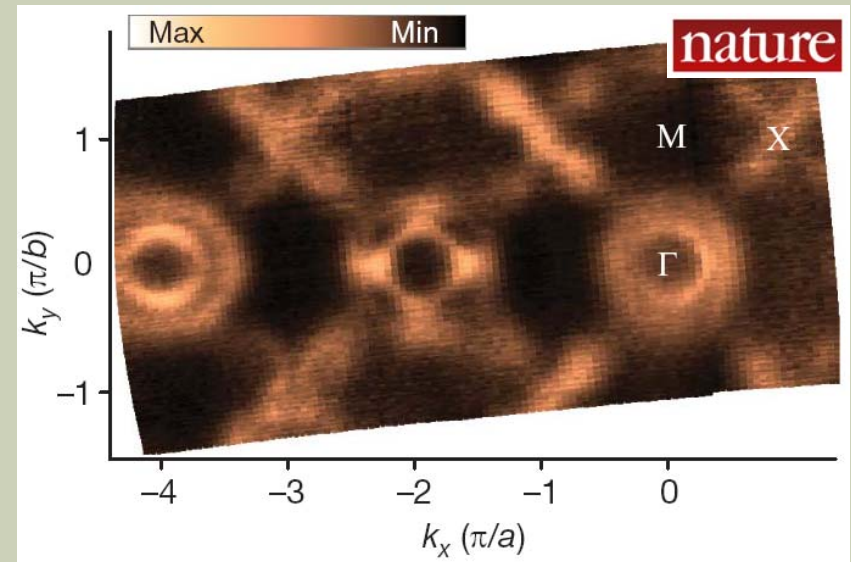
## Електронна структура та надпровідне впорядкування у нових надпровідниках на основі заліза

Виявлено чіткий зв'язок між електронною структурою (перехід Ліфшиця) та надпровідним параметром порядку, що вказує на новий механізм надпровідності (де ключовими є багатозонність і орбітальні резонанси) та обґрунтовує емпіричний метод для підвищення температури надпровідного переходу.

V. B. Zabolotnyy et al., *Nature* **457**, 569 (2009)

A. A. Kordyuk et al., *Phys. Rev. B* **83**, 134513 (2011)

A. A. Kordyuk, *Low Temp. Phys.* **38**, 888 (2012)



# СИЛЬНО КОРЕЛЬОВАНІ ЕЛЕКТРОННІ СИСТЕМИ: ВПЛИВ МАГНІТНИХ І НЕМАГНІТНИХ ДОМІШОК ТА МАГНІТНОЇ ФРУСТРАЦІЇ

**А.А. Звягін (ФТІНТ НАН України)**

Теоретично виявлено та досліджено взаємний вплив зарядової, магнітної та пружної ґраткової підсистем на статичні та динамічні властивості електронної й атомної структур різної вимірності (мультифероїки, квазіодновимірні магнітні системи, ультраохолоджені атоми), в яких міжчастинкові кореляції відіграють значну роль. Досліджено ефекти, важливі для застосування таких систем у квантовій електроніці, спінтроніці та при розробці квантових комп'ютерів.

Знайдено **новий клас точно розв'язуваних квантових сильно корельованих електронних моделей з домішками**. За допомогою точних рішень доведено, що магнітні та немагнітні домішки можуть суттєво змінити поведінку термодинамічних характеристик низьковимірних металовмісних магнітних сполук (спінові ланцюжки), особливо при низьких температурах. *J. Phys.:Condens. Matter* 9, 9939 (1997) ; *Phys. Rev. B* 55, 5027 (1997) ; *Phys. Rev. B* 56, 300 (1997) ; *J. Phys.:Condens. Matter* 9, 3543 (1997) ; *Phys. Rev. Lett.* 79, 4621 (1997) .

Доведено, що поведінка багатьох квазіодновимірних магнітних систем залежить від співвідношення обмінних взаємодій між найближчими спінами та наступними з найближчими, які призводять до магнітної фрустрації. Близкість до **квантового фазового переходу**, що пов'язан з **магнітною фрустрацією**, може суттєво змінити температурну залежність магнітної сприйнятливості та теплоємності таких магнітних матеріалів

*Phys. Rev. Lett.* 98, 077202 (2007); *Phys. Lett. A* 175, 295 (1993); *Phys. Rev. B* 68, 144426 (2003); *Phys. Rev. B* 73, 024427 (2006)

# МЕХАНІЗМИ ВПОРЯДКУВАННЯ МАГНІТНОЇ ПІДСИСТЕМИ НАНОРОЗМІРНИХ СТРУКТУР НА ОСНОВІ ТОЧКОВИХ КОНТАКТІВ

Ю. Г. Найдюк (ФТІНТ НАН України)

Встановлено механізми впорядкування магнітної підсистеми нанорозмірних структур на основі точкових контактів із феромагнітних матеріалів, пов'язані з передачею спінового моменту під дією струму надвисокої густини.

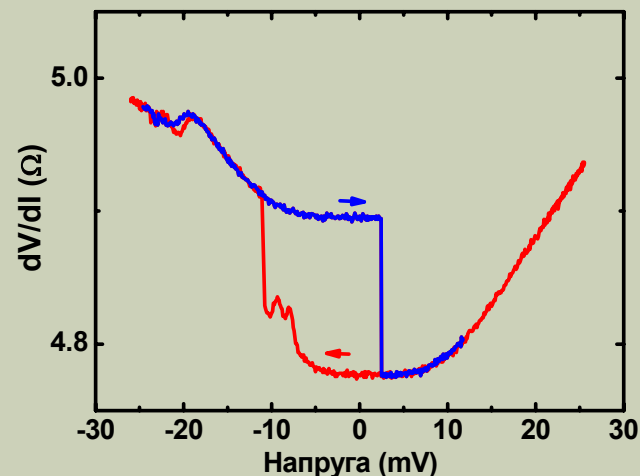
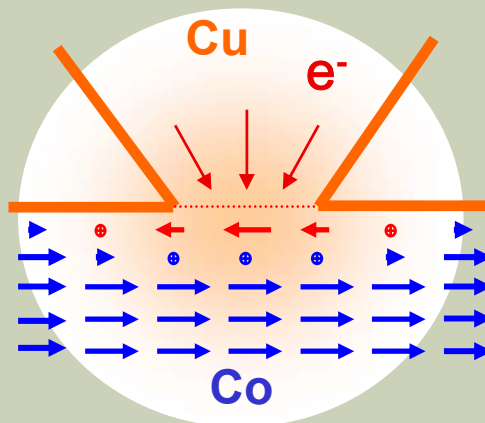
Монографія Yu.G. Naidyuk and I.K. Yanson, *Point-Contact Spectroscopy*, Vol. **145**, Springer Series in Solid-State Science, Springer, New York, 297p. (2005)

**В точковому контакті з феромагнетиком реалізовано структуру типу спінового вентиля (СВ).** Одним з елементів СВ виступає поверхневий феромагнітний шар (або нанокластер), який має послаблену обмінну взаємодію з внутрішніми феромагнітними шарами, утворюючи СВ на атомному масштабі. Побудовано струм-польову фазову діаграму магнітних станів поверхневого спінового вентиля реалізованого в точкових наноконтактах між феромагнітною плівкою кобальту і голкою з нормального металу.

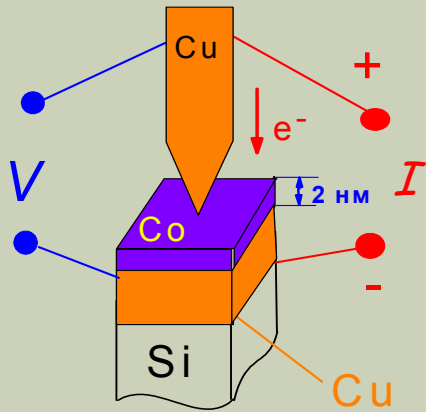
## Мікроконтактний спіновий венти́ль

Досягнуто майже на порядок менший розмір структур ніж у випадку “літографічних” СВ наноклонок, що важливо як для подальшої мініатюризації спінтронних пристроїв, так і для прогнозування їх критичних геометричних розмірів.

*Nano Letters*, **7**, 927 (2007).





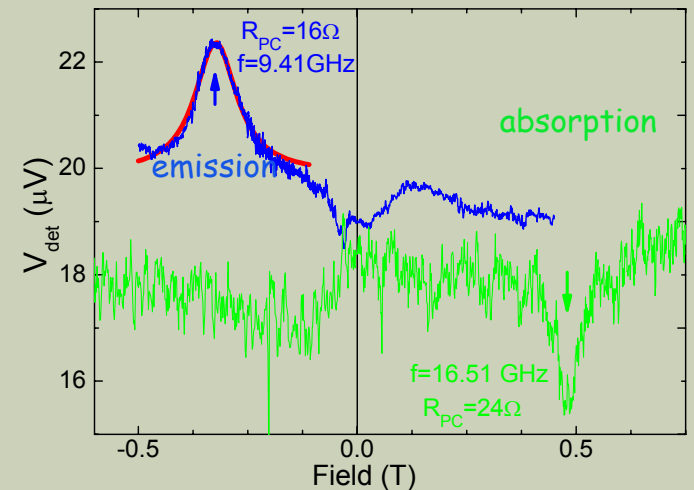
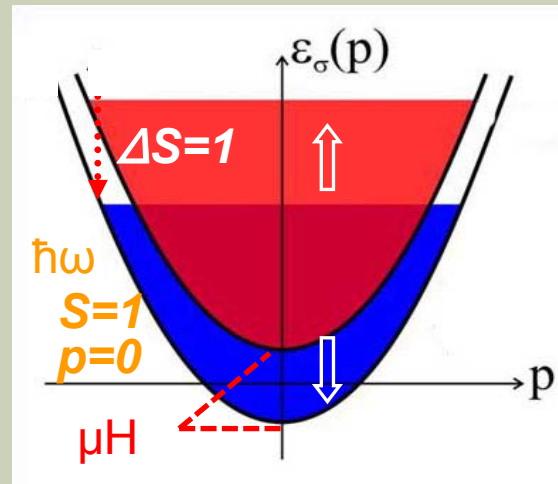
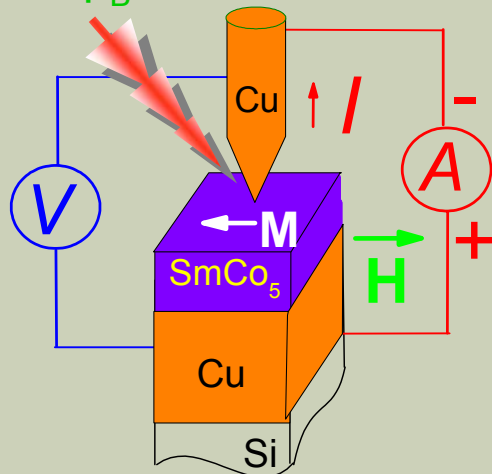


Виявлено ефект передачі спінового моменту в точкових контактах на основі одиначної ферромагнітної плівки. Результати вказують на можливість нового механізму реалізації передачі спінового моменту, що важливо для подальшого розуміння деталей спінового транспорту в наноструктурах та його використання. [Phys. Rev. Lett. 95, 186602 \(2005\)](#).

Виявлено стимульоване ВЧ випромінювання в результаті релаксації нерівноважної спінової накачки струмом високої густини в точкових контактах SmCo<sub>5</sub>—Cu

Такі процеси приводять до особливостей в магнітоопорі контакту, коли квант опромінення зрівнюється із зеєманівським розщепленням. Спостережений ефект підтверджує можливість використання нерівноважної спінової накачки для генерації ВЧ випромінювання і, таким чином, показує можливість реалізації джерела ГГц діапазону, частота якого задається магнітним полем. [New Journal of Physics 13, 023007 \(2011\)](#).

$$\hbar\omega = \mu_B H$$



# ОСОБЛИВОСТІ ТА МЕХАНІЗМИ ЗАРЯДОВОГО І СПІНОВОГО ВПОРЯДКУВАННЯ МЕТОДАМИ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОЇ ФІЗИКИ

Г. Є. Гречнєв (ФТІНТ НАН України)

Встановлено прояви електронного впорядкування в хімічному зв'язку, пружних, магнітних і спектральних властивостях різноманітних класів сполук металів і металоїдів та виявлено механізми і особливості гібридизації і спінової поляризації електронних станів у цих сполуках

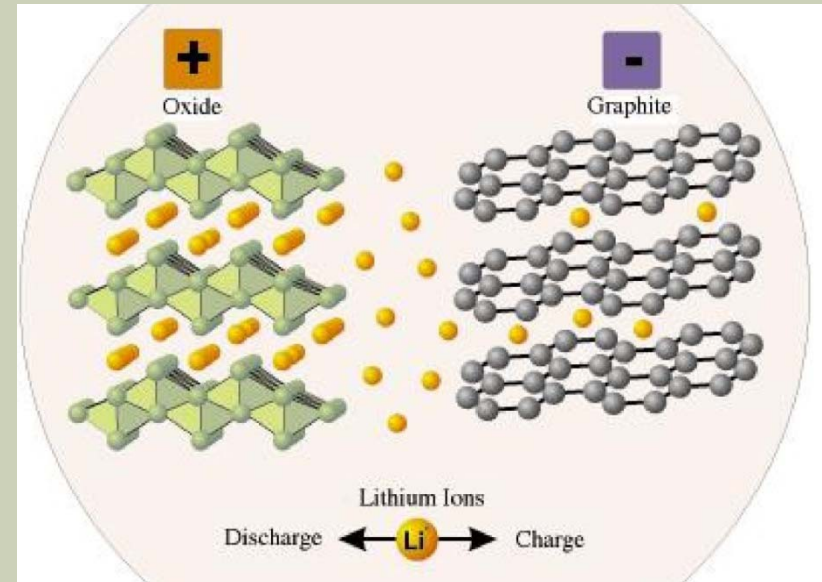
Розроблено **оригінальний метод розрахунків з перших принципів електронної структури та магнітних властивостей інтерметалевих сполук**, що містять делокалізовані та локалізовані стани 3d, - , 4f - и 5f-металів, залізовмісних надпровідників та ін.

**Виявлені нові магніто – об'ємні ефекти.**

*J. Magn. Magn. Mater. 192, 137 (1999).*

Теоретично досліджено еволюцію електронної структури, магнітних та електрохімічних властивостей у низці систем  $Mn_2O_4 \rightarrow LiMn_2O_4 \rightarrow Li_2Mn_2O_4$  (**сполуки для елементів перспективних літєвих батарей**). Встановлено сегрегацію іонів  $Mn^{+4}$  і  $Mn^{3+}$ , що відповідає зарядовому впорядкуванню.

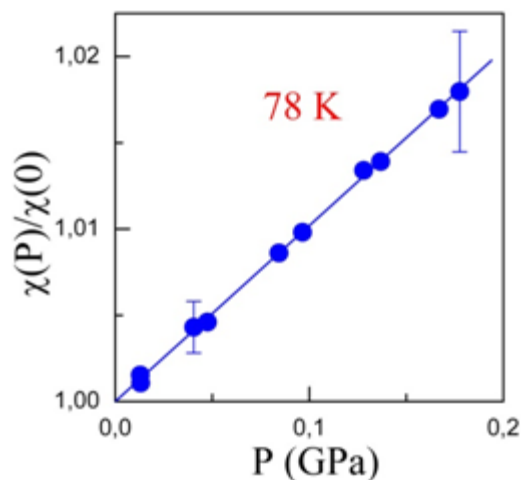
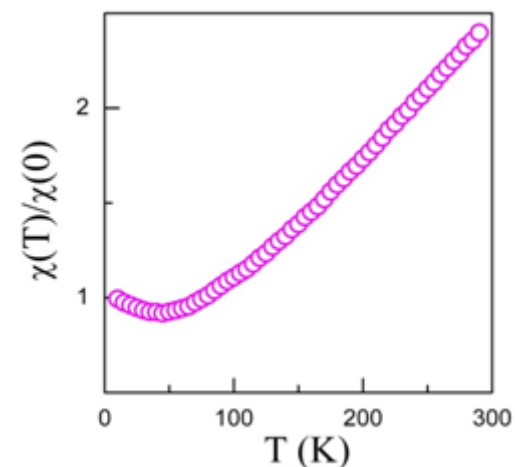
*Phys. Rev. B 65, 174408 (2002)*



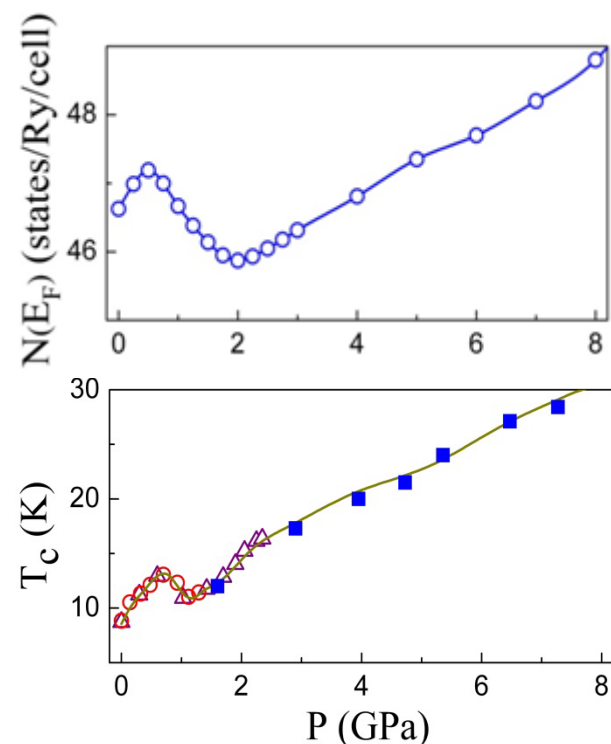
Виявлено аномальну залежність магнітної сприйнятливості шаруватої залізовмісної надпровідної сполуки **FeSe** від температури та тиску.

Спостережене значне зростання магнітної сприйнятливості **FeSe** з температурою доводить зонне походження магнетизму сполуки

*J. Phys.: Condens. Matter (2013)*



Аномальний ефект росту магнітної сприйнятливості під тиском є протилежним за знаком і більшим на порядок величини ніж його типові значення в зонних магнетиках.



Теоретичні розрахунки густини електронних станів на рівні Фермі в залежності від тиску корелюють з початковою баричною похідною від магнітної сприйнятливості і немонотонним ходом температури надпровідного переходу в широкому інтервалі тисків, що свідчить на користь БКШ механізму надпровідності в **FeSe**

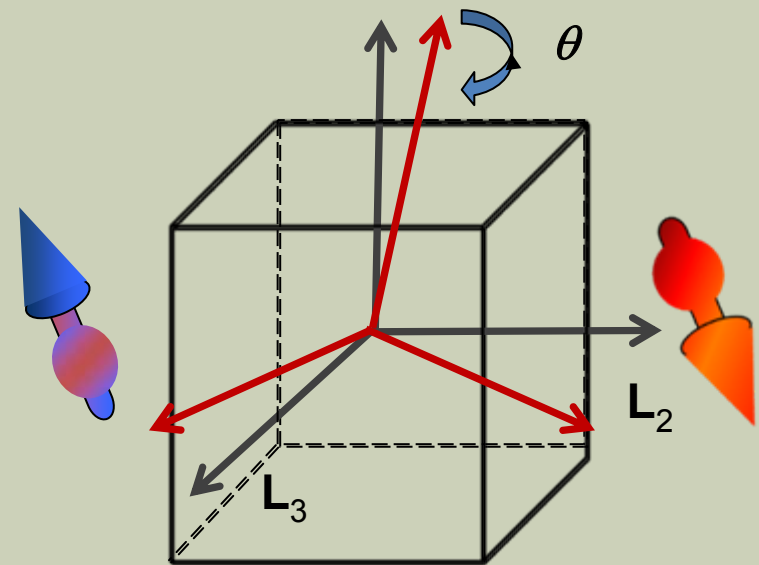
# МАГНІТОПРУЖНІ ВЗАЄМОДІЇ ТА СПІНТРОНІКА

О. В. Гомонай (НТУУ «КПІ»)

Виявлено механізми керування рівноважними та стаціонарними станами антиферомагнітних матеріалів за допомогою зовнішніх полів (електричного, магнітного, пружнього). Зокрема, запропоновано специфічні, притаманні саме антиферомагнетикам механізми, що відповідають за ефекти форми і формування рівноважної доменної структури, за передачу спінового крутильного моменту. Виявлено механізми магнітних фазових перетворень, пов'язані зі скінченними (а не нескінченно малими) зсувами окремих атомних площин і сильною взаємодією між магнітною підсистемою та кристалічною ґраткою.

Виявлено **спінтронні механізми керування станом антиферомагнетика** (АФМ), пов'язані з передачею спінового моменту. Доведено, що в АФМ спін-поляризований струм може призвести до обмінно-підсиленої динаміки магнітних моментів. Показано, що описаний механізм є достатньо загальним і не залежить від деталей структури АФМ.

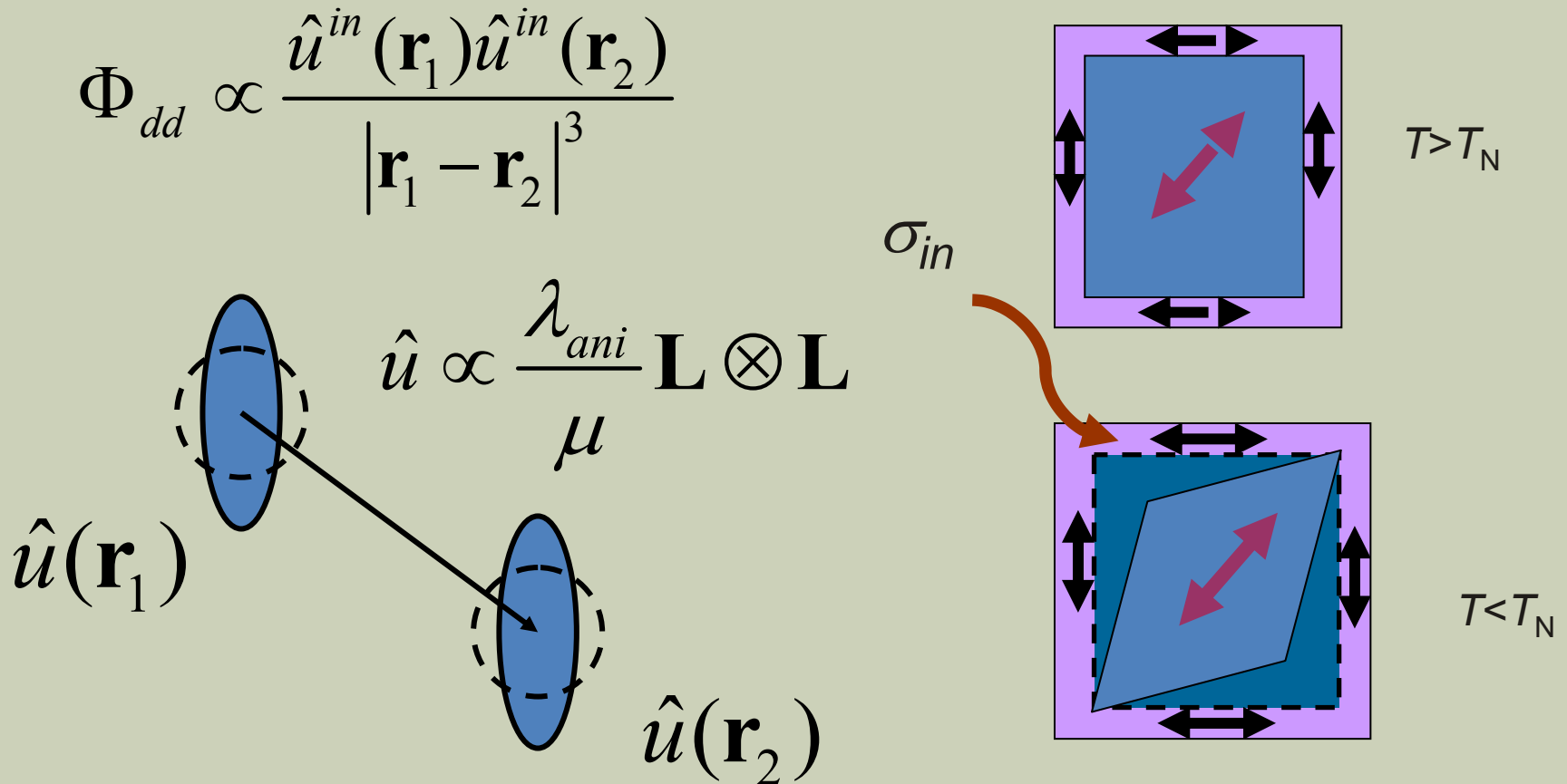
*J. Mag. Soc. Japan*, **32**, 535 (2008);  
*Low Temp. Phys.*, **34**, 198 (2008);  
*Phys. Rev. B*, **81**, 144427 (2010);  
*Phys. Rev. B*, **85**, 134446 (2012).



Досліджено роль магнітопружних механізмів у формуванні магнітної структури АФМ та багат шарових структур.

Введено поняття «магнітопружних зарядів» і створених ними далекосяжних полів «роздеформування» для опису неоднорідних станів АФМ.

*Phys. Rev. B*, **83**, 054424 (2011); *Phys. Rev. B*, **78**, 064427 (2008); *Eur. Phys. Lett.*, **81**, 17005 (2008);  
*Phys. Rev. B*, **75**, 174439 (2007); *J. Physics: Cond. Matter.*, **14**, 3959 (2002); *JMMM*, **242–245**, 1418 (2002);  
*Phys. Rev. B*, **64**, 054404 (2001); *Phys. Rev. B*, **64**, 064406 (2001).

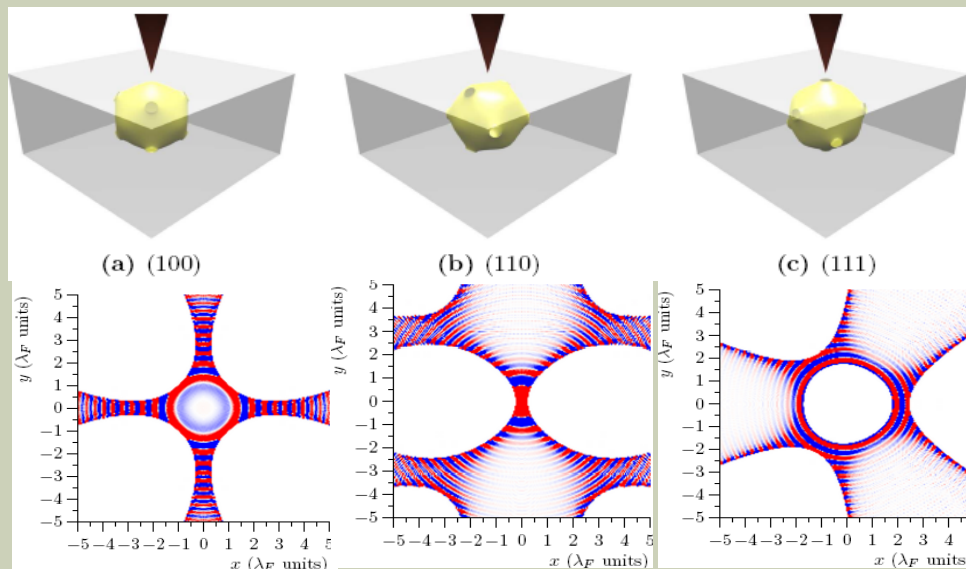


# КВАНТОВІ ІНТЕРФЕРЕНЦІЙНІ ЯВИЩА В КОНТАКТАХ НАДМАЛИХ РОЗМІРІВ

Ю. О. Колесніченко (ФТІНТ НАН України)

Побудовано теорію впливу **одиночних точкових дефектів** під поверхнею провідника на провідність тунельного наноконтакту сканувального тунельного мікроскопу; запропоновано шляхи застосування СТМ для визначення фізичних характеристик окремих дефектів кристалічної ґратки поблизу поверхні; запропоновано ідею нового методу дефектоскопії, передбачено можливість існування спінового струму у відсутні переносу заряду в джозефсонівських контактах між триплетними надпровідниками.

Запроновано **новий метод ферміології** – метод реконструкції контурів поверхні Фермі в об'ємі провідника за допомогою СТМ зображення його поверхні безпосередньо над дефектом **Phys. Rev. B., 74, 085411 (2006), ФНТ, 34, 268 (2008), New J. Phys. 15, 123013 (2013).**



Вперше встановлено зв'язок між анізотропією осциляційної картини на СТМ зображенні поверхні провідника над дефектом та геометрією контурів поверхні Фермі (ФП). Теоретично обґрунтовано можливість реконструкції енергетичного спектру носіїв заряду методом СТМ

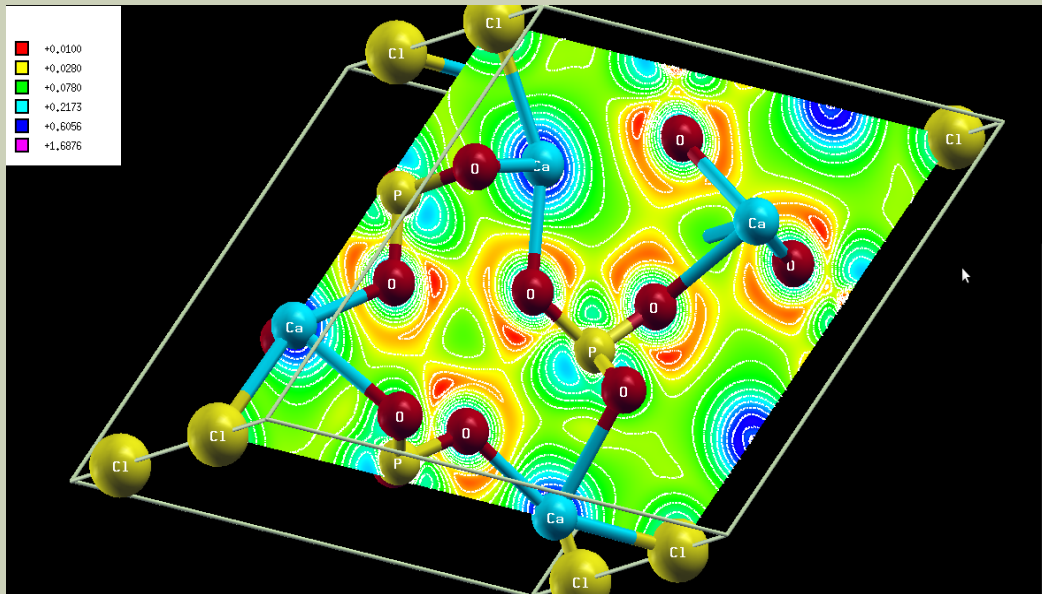
Теоретична картина осциляцій СТМ кондактансу в благородних металах для різних кристалографічних орієнтацій поверхні зразка демонструє можливість визначення напрямків відкритості ФП.

# ЕЛЕКТРОННА, АТОМНА БУДОВА ТА ФУНКЦІОНАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ МЕТАЛТЕТРАОКСИДНИХ СТРУКТУР

В. Л. Карбівський (ІМФ НАН України)

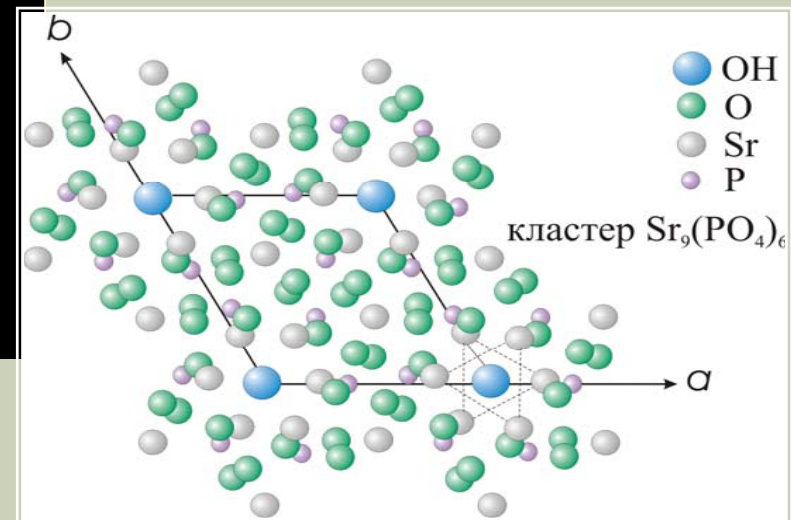
Експериментально та теоретично досліджено вплив механізмів ізоморфних ізовалентних заміщень, розмірності та зовнішніх чинників на функціональні та фізичні властивості ізоstrukturних апатитоподібних метал-тетраедричних систем.

Встановлено вплив атомного впорядкування на закономірності формування електронно-енергетичної будови, просторовий розподіл електронної густини та фізичні (рентгенівські спектри, механічні, теплові, акустичні, сорбційні) властивості.

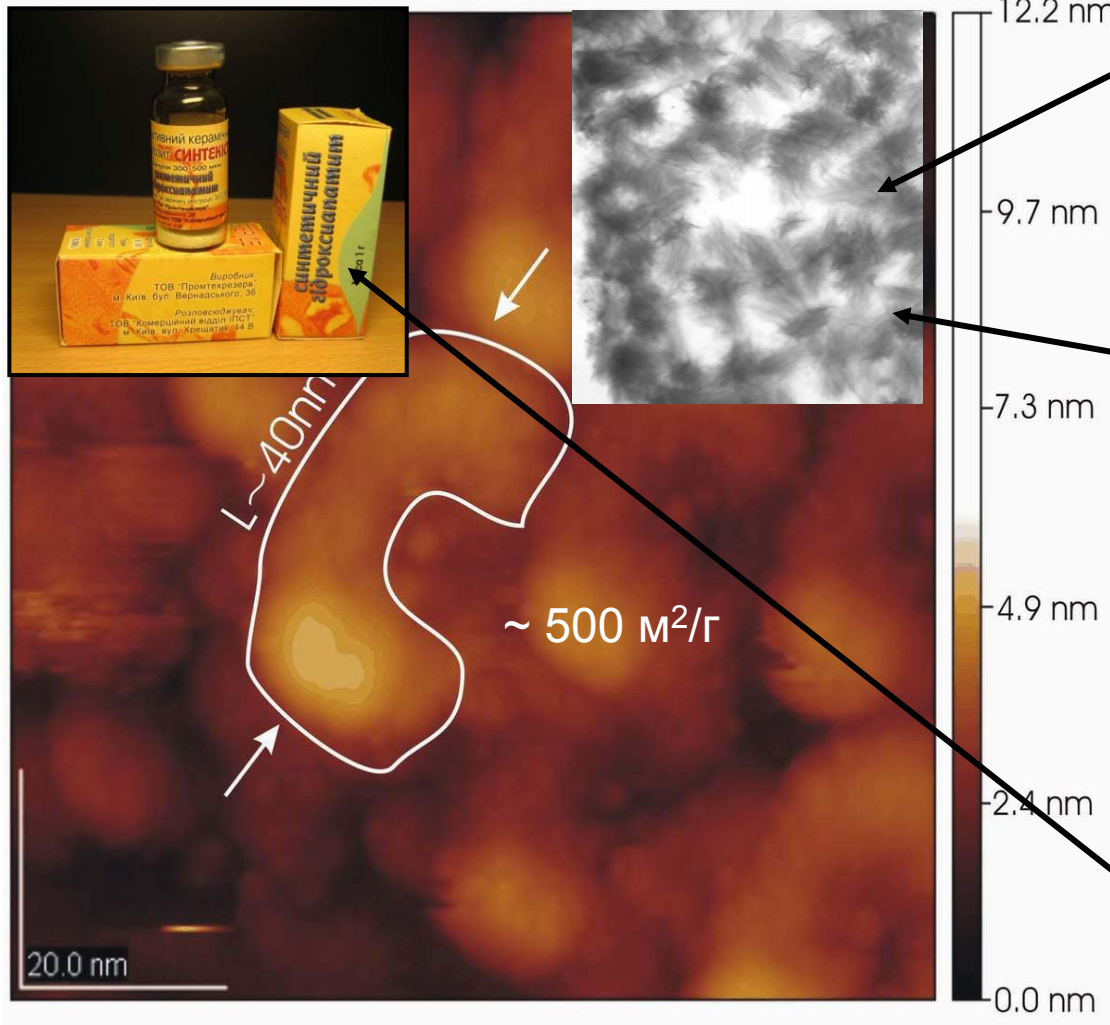


Встановлено, що основним структурним мотивом в аморфному апатиті стронцію є фрагмент кристалічної ґратки –  $\text{Sr}_9(\text{PO}_4)_6$

Встановлено просторовий розподіл електронної щільності, зокрема, вільні  $3p$   $P$  переважно локалізовані вздовж лінії, що з'єднує атоми  $P$  та центри граней  $\text{PO}_4$



# Практичні застосування апатитних наноматеріалів



• **СОРБЕНТИ** (до 600 м<sup>2</sup>/г)  
накопичення екологічно небезпечних сполук (Pb, Cd, Cu, F ...).

• **МАТРИЦІ** захоронення радіоактивних відходів.  
Розроблена технологія надійного видалення радіонуклідів з водних розчинів та їх довгострокового утримання в структурі апатиту.

• **БІОМАТЕРІАЛИ**  
використання в якості медичних препаратів

*АСМ зображення кальцієвого гідроксиапатиту*

В.Л.Карбовский, А.П.Шпак.. Апатиты и апатитоподобные соединения. Электронная структура и свойства. – Київ, Наукова думка, 2010. – 382 с.



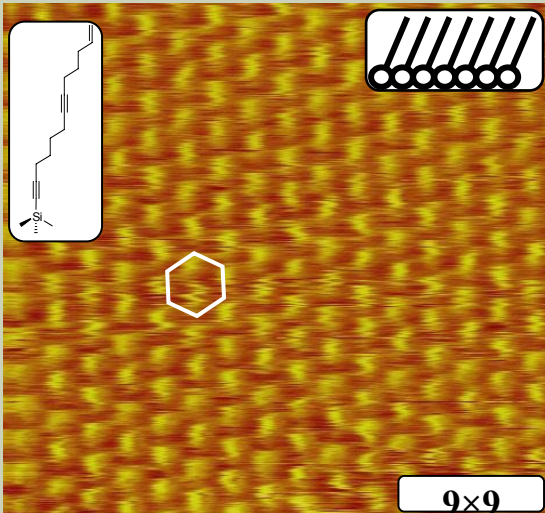
# САМООРГАНІЗАЦІЯ ОРГАНІЧНИХ МОЛЕКУЛ НА АТОМНО ГЛАДКИХ ПОВЕРХНЯХ

О. А. Марченко (ІФ НАН України)

Реалізовано концепцію СТМ-вимірювань у рідині, що дозволило кардинально розширити можливості методу СТМ при дослідженнях металоорганічного інтерфейсу.

Вперше знайдено технологію приготування і консервації в рідинному середовищі нестабільних в атмосфері атомно-гладких підкладок, завдяки чому стало можливим отримання високовпорядкованих плівок і СТМ-контроль їх структури на молекулярному рівні для нових класів органічних молекул.

На атомно-гладкій поверхні Au(111) вперше отримані високовпорядковані моношарові плівки молекул, структура яких (у тому числі електронна) може змінюватись під дією електричного поля або опромінення світлом. Це відкриває принципово нові можливості для створення поверхонь із зовні керованими властивостями.



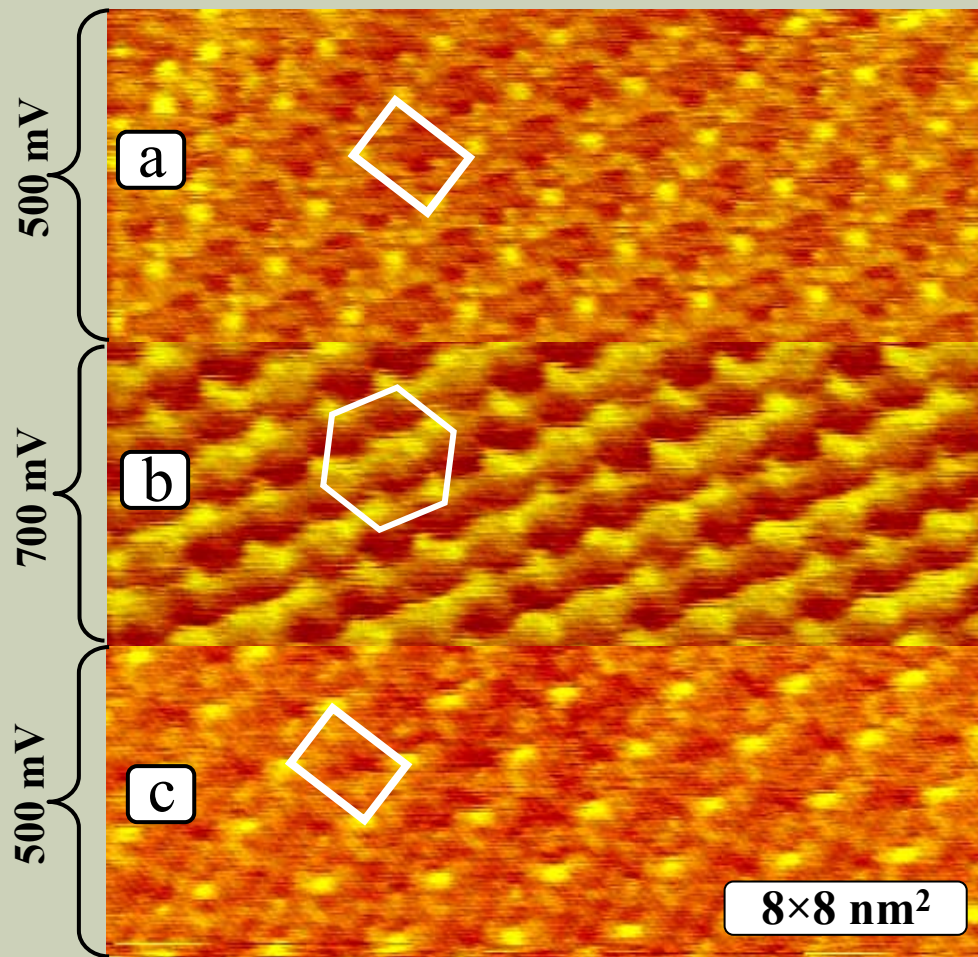
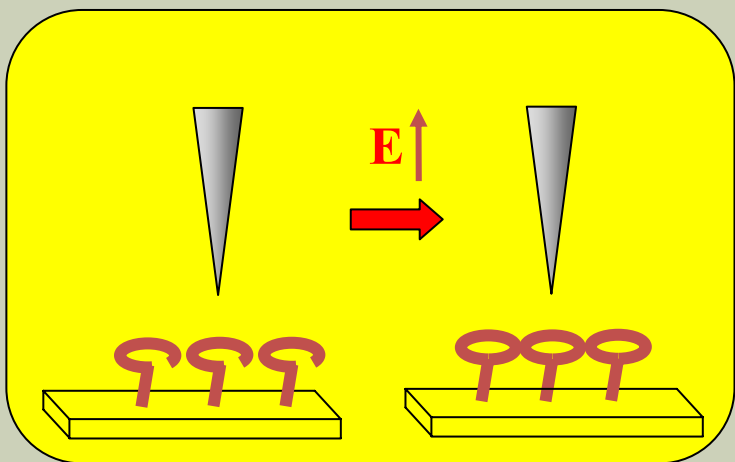
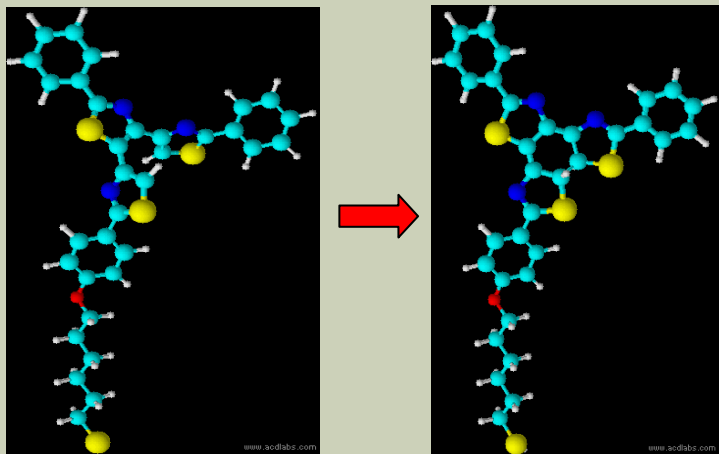
нм<sup>2</sup>

## Самоорганізація хемосорбованих молекул

З використанням рідинної технології отримано новий клас хемосорбованих високовпорядкованих моношарових плівок на основі похідних триметилсілацетиленів. Висока стійкість плівок і низька концентрація дефектів в латеральному напрямку дозволяє застосовувати їх як буферні шари при створенні елементної бази електроніки нового покоління, зокрема органічних польових транзисторів.

СТМ-зображення з молекулярним розділенням моношару триметилсілацетилену на Au(111)

# Стимульований електричним полем ефект перемикання в моношарах диарилетенів



Структура моношару і його властивості (оптичні, електронні, трибологічні), чутливі до змін електричного поля

# АТОМНА БУДОВА ТА МАГНІТНИЙ ПОРЯДОК В ІНВАРНИХ СПЛАВАХ

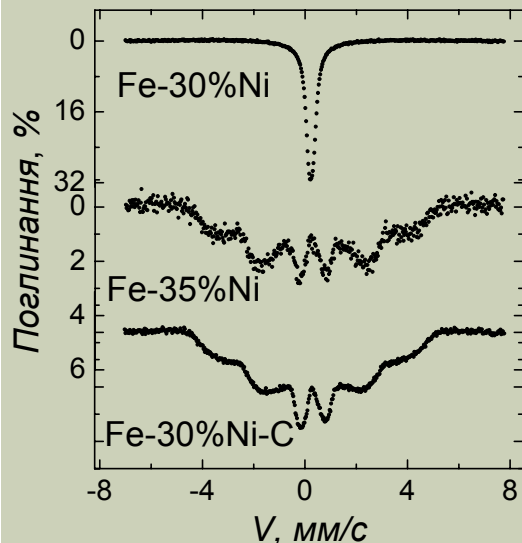
В. М. Надутов (ІМФ НАН України)

Встановлено різноманітний позитивний вплив вуглецю в комбінації з елементами заміщення та подрібнення структури на структурно-фазовий стан, атомний і магнітний порядки інварних (з малим температурним коефіцієнтом розширення) та антиінварних сплавів ГЦК-Fe–Ni і, як наслідок, на фізичні та механічні властивості за умов змінних температур і механічних навантажень.

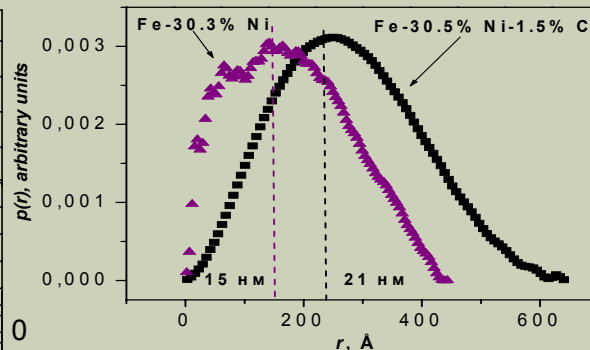
## Магнітний порядок і магнітні властивості сплавів ГЦК-Fe–Ni–C

Виявлено різнобічний позитивний вплив вуглецю в комбінації з елементами заміщення Me на атомний і магнітний порядок, структурно-фазовий стан ГЦК-сплавів системи Fe–Ni–Me–C

ЯГР-спектри

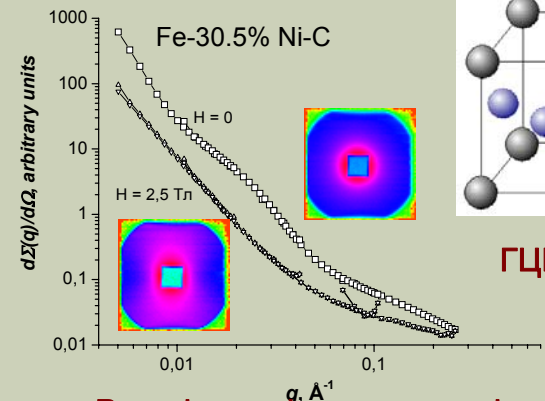


Малокутове розсіяння нейтронів

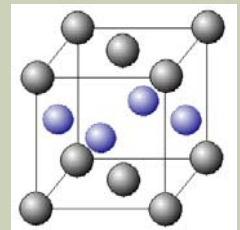


Вуглець розширює розподіл надтонких магнітних полів і розмірів магнітних неоднорідностей

*Mater. Sci. Forum*, 2004, 443–444, p. 251.



Реакція магнітних неоднорідностей на зовнішнє магнітне поле

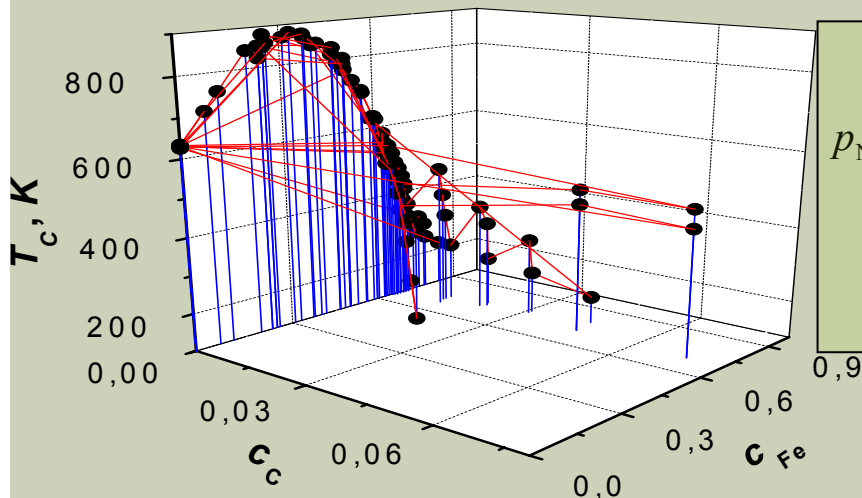


ГЦК-FeNi

# Обмінна взаємодія в Fe–Ni та Fe–Ni–C

Залежність температури магнітного фазового переходу від вмісту Ni та C

$$T_C \approx -\frac{1}{6} \left( p_{\text{NiNi}} (1 - c_{\text{Fe}}) + p_{\text{FeFe}} c_{\text{Fe}} - \sqrt{(p_{\text{NiNi}} (1 - c_{\text{Fe}}) - p_{\text{FeFe}} c_{\text{Fe}})^2 + 4 p_{\text{NiFe}}^2 c_{\text{Fe}} (1 - c_{\text{Fe}})} \right)$$



Зв'язок параметрів  $\{p_{\alpha\alpha'}\}$  з обмінними «інтегралами»  $\{J_{\alpha\alpha'}\}$  і спіновими числами  $\{s_{\alpha}\}$

$$p_{\text{NiNi}} = s_{\text{Ni}} (1 + s_{\text{Ni}}) \tilde{J}_{\text{NiNi}}(0) / k_B \quad p_{\text{FeFe}} = s_{\text{Fe}} (1 + s_{\text{Fe}}) \tilde{J}_{\text{FeFe}}(0) / k_B$$

$$p_{\text{NiFe}} = \sqrt{s_{\text{Ni}} (1 + s_{\text{Ni}}) s_{\text{Fe}} (1 + s_{\text{Fe}})} \tilde{J}_{\text{NiFe}}(0) / k_B$$

$$J_{\alpha\alpha'}(r_I = a / \sqrt{2}) \approx \tilde{J}_{\alpha\alpha'}(0) / 12$$

$$s_{\text{Fe}} = 3/2 \text{ і } s_{\text{Ni}} = 1/2$$

**Fe–Ni**

$$J_{\text{FeFe}} \approx -6 \text{ меВ}$$

$$J_{\text{NiNi}} \approx +18 \text{ меВ}$$

$$J_{\text{FeNi}} \approx +20 \text{ меВ}$$



**Fe–Ni–C**

$$J_{\text{FeFe}} \approx -21,8 \text{ меВ}$$

$$J_{\text{NiNi}} \approx +15,5 \text{ меВ}$$

$$J_{\text{FeNi}} \approx +26,0 \text{ меВ}$$

С сприяє мішаній обмінній взаємодії та неоднорідному магнітному порядку в сплавах, який характеризується широким розподілом надтонких магнітних полів (ЯГР-експеримент) і розмірів магнітних неоднорідностей (МКРН-експеримент)

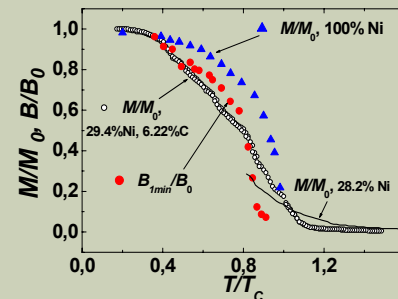
$$J_{\text{FeFe}} < 0$$

$$J_{\text{NiNi}} > 0$$

$$J_{\text{NiFe}} > 0$$

$$C \uparrow J_{\text{FeFe}} \text{ й } J_{\text{FeNi}}; C \downarrow J_{\text{NiNi}}$$

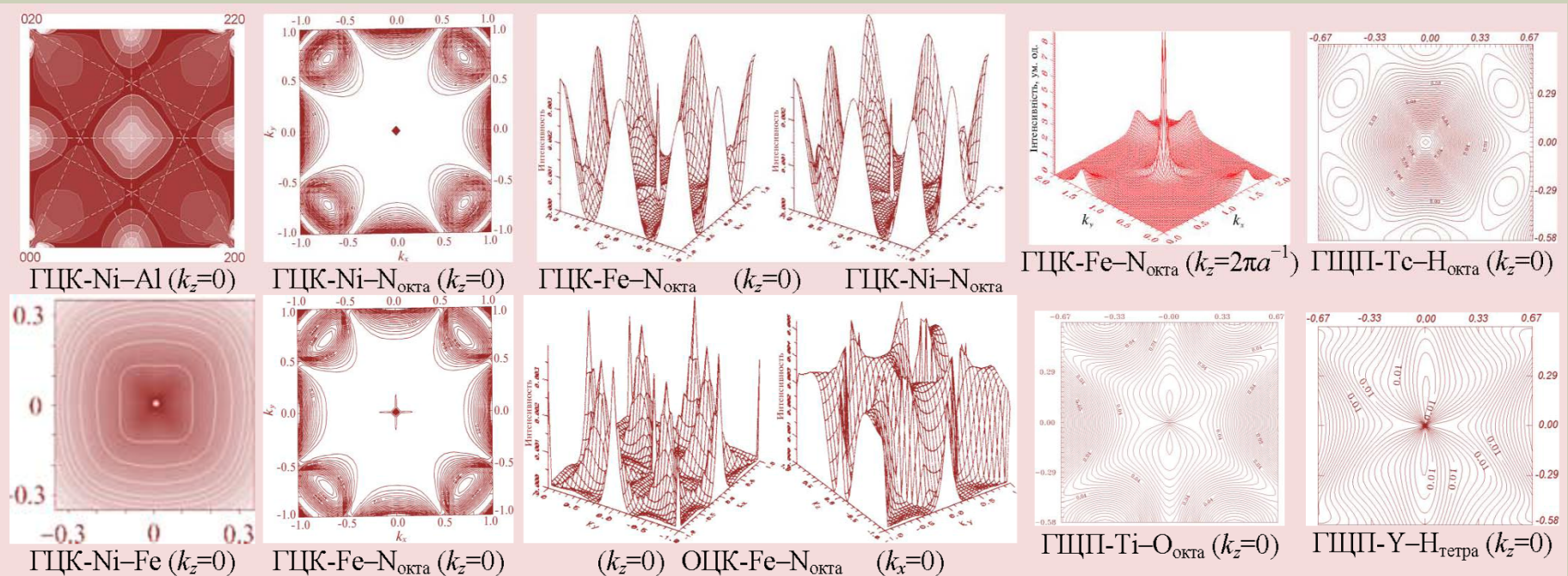
Змінює залежність намагніченості від температури



# МІЖАТОМНІ ВЗАЄМОДІЇ ТА ПЕРЕРОЗПОДІЛ АТОМІВ У СКІНЧЕННИХ ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ ВТІЛЕННЯ–ЗАМІЩЕННЯ

В. А. Татаренко (ІМФ НАН України)

Виявлено та вивчено ефекти обмеженості розмірів і складності (непримітивності) внутрішнього устрою кристалічних структур, а також розмірної невідповідності атомів компонентів та їх магнетизму у взаємодії дефектів і термодинаміці й кінетиці утворення надструктур твердих розчинів, що упорядковуються.



Прогнозовані картини розподілу значень інтенсивності дифузного розсіяння променів по оберненому простору ґратниць скінчених твердих розчинів заміщення та втілення із ненапруженою (“вільною”) поверхнею залежно від симетрії вузлів або міжвузловин (октаедричних чи то тетраедричних) відповідно. *Solid State Ionics* (Elsevier), 1997, **101–103**, P. 1061; *Int. J. Hydrogen Energy* (Elsevier), 2001, **26**, Iss. 5, P. 469.