

Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования «Пермский государственный  
национальный исследовательский университет»

На правах рукописи



Циберкин Кирилл Борисович

**КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА  
НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ПАРАМАГНЕТИКОВ  
И УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ**

1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Пермь – 2025

Работа выполнена на кафедре теоретической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Пермский государственный национальный исследовательский университет»

**Научный консультант:**

Хеннер Виктор Карлович, доктор физико-математических наук, профессор; Пермский государственный национальный исследовательский университет, г. Пермь.

**Официальные оппоненты:**

Фельдман Эдуард Беньяминович, доктор физико-математических наук, профессор; Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, г. Черноголовка.

Юкалов Вячеслав Иванович, доктор физико-математических наук, доцент; Объединённый институт ядерных исследований, г. Дубна.

Лебедев Николай Геннадьевич, доктор физико-математических наук, профессор; Волгоградский государственный университет, г. Волгоград.

**Ведущая организация:**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»»

Защита состоится «4» сентября 2025 г. в 15<sup>15</sup> на заседании диссертационного совета 24.2.358.03 при Пермском государственном национальном исследовательском университете по адресу: г. Пермь, ул. Букирева, д. 15.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ПГНИУ и на сайте <http://www.psu.ru>

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
к.т.н.



Сосунов Алексей Владимирович

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** Значимой частью развития технологий выступает совершенствование материальной базы для быстродействующих вычислительных устройств. Изучается управление спиновыми токами на основе коллективных процессов в ансамблях носителей заряда. Развиваются спинтроника и магноника – подходы к реализации устройств обработки и передачи данных на базе спиновых волн в диэлектриках, тонких плёнках, разбавленных магнитных полупроводниках и др.

Сегодня акцент в исследованиях смещается к работе с единичными объектами и структурами, содержащими  $10^1$ – $10^4$  магнитных центров. Например, фуллереноподобная углеродная сфера радиусом 3–5 нм состоит из  $10^3$ – $10^4$  атомов. При осаждении на её поверхности магнитной примеси в концентрации 5–10% количество ионов последней составит  $10^2$ – $10^3$ , тогда как расчёты из первых принципов реализуемы для систем, содержащих не более 10–20 частиц. Некоторое расширение этого предела реализуется на практике исключением из рассмотрения наименее вероятных квантовых переходов<sup>1</sup>.

Малая размерность систем не позволяет применить и статистические подходы, поэтому важно построение масштабируемых теоретических моделей спиновой динамики наноструктур. Комбинирование подходов теории сплошной среды, коллективных явлений и нелинейной динамики позволяет перейти к осреднённому описанию систем и реализации эффективных моделей их свойств, получить из первых принципов эмпирические параметры, описывающие динамику спиновых и электронных систем, в частности, параметры релаксации в моделях типа уравнений Ландау–Лифшица, Ландау–Лифшица–Гильберта (ЛЛГ)<sup>2</sup>.

Глубоко проработанная теория спиновых волн (СВ) применяется прежде всего к макроскопическим кристаллам. Характерная энергия обменного взаимодействия в магнитоупорядоченных веществах – порядка  $10^{-1}$ –1 эВ, и СВ в концентрированных ферро- и антиферромагнетиках устойчивы, реализуются при сравнительно высоких температурах. Изучаются также ядерные СВ – связанные колебания электрон-

---

<sup>1</sup> Kuprov I. Spin (Springer, 2023). 395 p.

<sup>2</sup> Demishev S.V. *Appl Magn Reson* (2024) **55**, 1091–1114.

ных и ядерных спинов в кристаллах типа  $\text{MnCO}_3$ ,  $\text{CsMnF}_3$  и др.<sup>3</sup>. Теория СВ в пределе сплошной среды описывает динамику локальной намагниченности, в сочетании с экспериментом обеспечивая базу для изучения нелинейных явлений, реализации устройств спинтроники<sup>4</sup>.

Энергия дипольного взаимодействия в тонких плёнках соединений редкоземельных металлов ( $\text{GdCl}_3$ ,  $\text{EuO}$  и др.) составляет  $10^{-2}$ – $10^{-1}$  мэВ, и в ряде случаев она превышает обменную энергию<sup>5,6,7</sup>, что исключает спонтанное упорядочение вплоть до единиц К и ниже. РККИ-взаимодействие близкой интенсивности реализуется в двухкомпонентных системах, образованных внедрением примеси в парамагнитный кристалл ( $(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)_2\text{B}$ ,  $\text{Gd}_{1.90}\text{Co}_{0.10}\text{O}_{3-\delta}$ )<sup>8,9</sup>, и включающих атомы с различными гиромагнитными отношениями, димерных системах, формируемых парами атомов на проводящей подложке (Н, F, N на С, Mn, V, Cr на Cu)<sup>10,11</sup>, спиновых кластерах случайной структуры, внедрённых в диамагнетик.

Перечисленные системы объединяются в класс низкотемпературных парамагнетиков<sup>12</sup>. В сильном внешнем поле для них вводятся коллективные моды как отклонения магнитных моментов от насыщения. Анализ уравнений эволюции спиновых операторов методами теории нелинейных волн в приближении сплошной среды позволяет реализовать систематическое описание динамики намагниченности в этих условиях<sup>13,14</sup>. Для численного моделирования свойств ансамблей примесных атомов и димерных систем эффективно осреднение по случайным пространственным распределениям магнитных центров<sup>15</sup>.

---

<sup>3</sup> Андриенко А.В. и др. *УФН* (1991) **161**, № 10, 1–35.

<sup>4</sup> Никитов С.А. и др. *УФН* (2019) **185**, 1099–1128.

<sup>5</sup> Costa Fihlo R.N., Gottam M.G., Farias G.A. *Phys Rev B* (2000) **62**, 6545.

<sup>6</sup> Meloche E. et al. *Phys Rev B* (2011) **83**, 174425.

<sup>7</sup> Wessler Ch. et al. *Comm Phys* (2022) **5**, 185.

<sup>8</sup> Schoop L.M. et al. *Phys Rev B* (2014) **89**, 224417.

<sup>9</sup> Sarkar B.J. et al. *J Alloys Compd* (2016) **656**, 339–346.

<sup>10</sup> Hu Zh. et al. *Adv Funct Mater* (2022) **32**, 2203179

<sup>11</sup> Tung J.C. et al. *J Phys D* (2011) **44** 205003

<sup>12</sup> Глазков В.Н. *УФН* (2024) **194**, 1320–1325.

<sup>13</sup> Фельдман Э.Б., Хитрин А.К. *ЖЭТФ* (1990) **98**, 967–977.

<sup>14</sup> Giorgadze N., Khomeriki R. *J Low Temp Phys* (1999) **116**, 381–392.

<sup>15</sup> Henner E.K. et al. *J Magn Reson* (1978) **32**, 107–114.

**Целью диссертационной работы** является развитие теории коллективных мод намагниченности в концентрированных системах с дипольным и РККИ-взаимодействием вблизи состояния насыщения, в том числе описание спин-спиновой релаксации и спиновой диффузии, нелинейных волн и осреднённых сигналов намагниченности в условиях реализации коллективных мод, а также построение модели коллективной динамики электронов в углеродных наноструктурах с магнитной примесью.

**Задачи диссертационной работы** заключаются в:

1. построении аналитических моделей динамики локальной намагниченности концентрированных систем с дипольным или РККИ-взаимодействием в рамках приближения коллективных мод и сплошной среды, и установлении общих закономерностей динамики намагниченности таких спиновых систем;
2. исследовании равновесных и динамических свойств низкотемпературного парамагнетика при реализации спин-волнового режима вблизи насыщения в сильном внешнем магнитном поле;
3. выявлении в рамках построенных моделей условий существования волновых режимов одно- и двухкомпонентных магнитных систем;
4. установлении границ применимости построенных моделей к описанию электронных и магнитных свойств макро- и мезоскопических спиновых систем, углеродных наноструктур с магнитными примесями;
5. анализе влияния степени беспорядка в системе димеров, которые имеют случайный размер и энергию РККИ-взаимодействия с заданной функцией распределения, на намагниченность системы;
6. изучении перехода от индивидуальных осциллирующих сигналов намагниченности, полученных от элементов ансамбля спиновых кластеров, которые состоят из малого числа магнитных центров, случайным образом расположенных в диамагнитной решётке, к осреднённому монотонно убывающему сигналу.

**Научная новизна результатов**

1. С применением вторичного квантования и приближения сплошной среды для низкотемпературного парамагнетика вблизи состояния насыщения получены уравнения динамики локальной намагниченности, описывающие спин-спиновую релаксацию и спиновую диффузию без применения феноменологических моделей.

2. Методом многих масштабов проанализирована иерархия режимов эволюции намагниченности концентрированного низкотемпературного парамагнетика в приближении сплошной среды, показано, что учёт несекулярных членов дипольного взаимодействия ограничивает допустимые направления движения солитонов.
3. Сформулирована динамическая модель двухкомпонентного материала, описывающая связанные колебания намагниченности его подсистем в приближении сплошной среды с учётом дипольного взаимодействия атомов основной решётки между собой, с атомами примеси, и РККИ-взаимодействия примеси.
4. Для ансамбля димеров найдено, что немагнитное состояние реализуется при отрицательном среднем значении АФМ-взаимодействия и малой дисперсии, и разрушается по мере роста последней.
5. Проведено осреднение пробных функций, описывающих огибающие сигналов поперечной намагниченности малых спиновых кластеров для нахождения суммарного сигнала их ансамбля; аналитически и численно продемонстрирован переход от осциллирующих сигналов к монотонному затуханию.
6. Реализовано осреднение уравнений эволюции операторов электронной плотности для углеродной наносферы в пределе сплошной среды, на основе полученной модели рассчитаны оптические, электронные и магнитные характеристики массива наносфер случайного размера, согласующиеся с экспериментальными результатами.

#### **Выносимые на защиту положения**

1. Подход на основе коллективных мод к спиновым системам с дипольным или РККИ-взаимодействием вблизи состояния насыщения в сильном внешнем поле позволяет получить уравнения намагниченности, из первых принципов описывающие спин-спиновую релаксацию и спиновую диффузию.
2. В дипольной системе реализуется единая иерархическая структура динамических процессов на различных масштабах: дипольное уширение соответствует процессам со временем поперечной релаксации  $T_2$ , формирование нелинейных волн, солитонов намагниченности происходит на временах  $T_2^2$ ,  $T_2^3$  и больших; устойчивость солитонов ограничена влиянием несекулярных членов дипольного взаимодействия.

3. В двухкомпонентной системе реализуются связанные волны намагниченности и солитоны, устойчивые при положительном знаке РККИ-взаимодействия ближайших примесных атомов, и угле между внешним полем и направлением солитонов, меньшим  $\arccos(1/\sqrt{3}) \approx 57.3^\circ$ .
4. Для ансамбля димеров с заданной функцией распределения РККИ-взаимодействия немагнитное состояние разрушается при увеличении дисперсии энергии; в области низких температур пропорционально дисперсии размываются границы перехода в немагнитное и парамагнитное состояния.
5. Суммарный сигнал поперечной намагниченности ансамбля спиновых кластеров случайной структуры с дипольным взаимодействием ограничен законом  $(t/T_2)^{-1}$ , реализующимся при увеличении дисперсии размера кластеров; оценка, полученная осреднением модельных огибающих сигналов намагниченности, согласуется с численным моделированием динамики ансамбля.
6. При реализации коллективных мод спад поперечной намагниченности на временах, больших  $T_2$ , идёт по закону  $M_x \sim (t/T_2)^{-d/2}$ , где  $d$  – пространственная размерность системы, и соответствует диффузионному процессу; зависимость отвечает экспериментальным и теоретическим результатам исследований спиновой динамики NV-центров<sup>16</sup>, одномерных цепочек<sup>17,18</sup>.
7. Сплошносредная модель углеродной наноболочки позволяет найти спектр поглощения массива таких оболочек случайного размера, соответствующий данным ИК-спектроскопии, а в сочетании с измерениями проводимости – параметры осреднённой  $t$ – $U$  модели, интегрально характеризующие материал.

**Методология и методы исследования.** Все результаты, представленные в диссертационной работе, получены на основе актуальных подходов. Модели спин-волновой динамики построены применением преобразований Холстейна–Примакова и Дайсона–Малеева к гамильтонианам спиновых систем, включающих дипольное и обменное взаимодействие. Описание электронных свойств реализуется в рамках

---

<sup>16</sup> Staudenmaier N. et al. *npj Quantum Inf* (2022) **8**, 120.

<sup>17</sup> Bochkin G.A., Feldman E.B., Vasilev S.G. *Phys Lett A* (2019) **383**, 2993–2996.

<sup>18</sup> Ramos F.B. et al. *Phys Rev B* (2023) **107**, 075138.

модели Хаббарда. На базе перечисленных моделей строятся эволюционные уравнения Гейзенберга для решёточных операторов, которые преобразуются к полевым. Используемый численный метод моделирования динамики намагниченности основывается на прямом вычислении уровней энергии и волновых функций спиновой системы с последующим построением в найденном базисе оператора эволюции и прямым вычислением наблюдаемых функций намагниченности.

**Достоверность результатов** работы обеспечивается построением теоретических моделей на базе установленных фундаментальных соотношений и представлений квантовой механики, квантовой и статистической теории твёрдых тел, методов нелинейной динамики, сопоставлением результатов аналитических расчётов и численного моделирования, экспериментов при наличии такой возможности, сопоставлением численных результатов, полученных независимыми подходами, согласованием результатов с фундаментальными закономерностями физики магнитных явлений.

**Практическая значимость.** Результаты работы имеют приложения к разработке и исследованию перспективных материалов, применимых в устройствах спинтроники и магноники: резонаторах и модуляторах, ячейках памяти, позволяют прогнозировать рабочие частоты, времена хранения и скорость передачи информации в них, нахождение условий устойчивости спиновых состояний в материалах.

Исследования, вошедшие в диссертацию, проводились в рамках работ по следующим проектам: грант РФФИ 17-42-590271 «Исследование электромагнитных свойств углеродных наноболочек для накопителей энергии высокой ёмкости»; грант Совета по грантам Президента Российской Федерации МК-1422.2020.2 «Волновые явления в парамагнетиках, разбавленных ферромагнитными примесями»; проекты Международных исследовательских групп при поддержке Министерства образования и науки Пермского края, совместно с Университетом Луисвилля (США): С-26/628 «Экспериментальное и теоретическое изучение физических свойств новых магнитных наноматериалов»; С-26/798 «Применение углеродных наноболочек для создания новых типов суперконденсаторов».

**Апробация работы.** Результаты, приведённые в диссертации, представлялись на конференциях: 2<sup>nd</sup> International Conference and Exhibition on Mesoscopic and Condensed Matter Physics (Чикаго, 2016),

научная школа «Нелинейные волны» (Нижний Новгород, 2018, 2024), всероссийская конференция «Пермские гидродинамические научные чтения» (Пермь, 2018, 2020, 2023), региональная конференция «Физика для Пермского края» (Пермь, 2018, 2019, 2020), международная школа «Коуровка» (Екатеринбург, 2020), XXI всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния СПФКС (Екатеринбург, 2021), международный симпозиум «Неравновесные процессы в сплошных средах» (Пермь, 2021), международная конференция “Modern Development of Magnetic Resonance” (Казань, 2021, 2023), международный симпозиум «EASTMAG-2022» (Казань, 2022), международная конференция “Magnetic Resonance – Current State and Future Perspectives (EPR-80)” (Казань, 2024), и семинарах; ПГНИУ по теоретической физике (Пермь, 2021, 2022, 2024), ИТЭФ НИЦ «Курчатовский институт» (Москва, 2024), ИРЭ РАН, семинар «Проблемы магнитного резонанса» (Москва, 2024), ФТИ им. Иоффе, сектор теории оптических и электрических явлений в полупроводниках (Санкт-Петербург, 2024), заседании Ученого совета КФТИ им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН (Казань, 2025), научном семинаре ФМИ ПГНИУ (Пермь, 2025).

**Публикации и личный вклад автора.** Материалы диссертации опубликованы в **18** статьях в рецензируемых журналах, в том числе **15** – в изданиях, индексируемых Scopus, Web of Science и включённых в RSCI, ядро РИНЦ [1–15], **3** статьях в изданиях перечня ВАК [16–18], и в 23 материалах конференций, тезисах докладов и статьях в иных изданиях. Получено 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ [19].

В опубликованных работах автор лично разрабатывал и формулировал теоретические модели, проводил аналитические расчёты волновых процессов в слабо связанных магнетиках, численное моделирование динамики систем, давал интерпретацию результатов и оценку их применимости, достоверности, подготавливал тексты и иллюстрации. В работах, выполненных в сотрудничестве с экспериментаторами и разработчиками численных алгоритмов моделирования спиновой динамики, автор непосредственно участвовал в планировании исследований, формулировке конкретных задач, интерпретации результатов, верифицировал и модернизировал численные алгоритмы, принимал участие в подготовке коллективных публикаций.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, шести глав и заключения со списком цитируемой литературы. Общий объем диссертационной работы составляет 251 страницу, включая 70 иллюстраций и 7 таблиц. Библиография содержит 360 наименований.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** дана общая характеристика работы.

**В первой главе** представлен обзор современных тенденций в исследовании коллективных магнитных явлений в конденсированных средах и их приложений, и основных достижений в применении методов нелинейной динамики к физике конденсированных сред.

В ходе развития микроэлектроники сформировались новые направления, основанные на манипулировании спиновыми моментами атомов – спинтроника<sup>19</sup>, магноника<sup>4</sup> и др. Намагниченность в магнитных и сверхпроводниковых гетероструктурах проявляет коллективную динамику с ярко выраженными нелинейными эффектами, реализуются связанные электронно-спиновые моды<sup>10,20</sup>. Интегральная динамика материалов эффективно описывается уравнениями намагниченности, полученными в пределе сплошной среды<sup>21</sup>.

Накопленная эмпирическая база показывает, что в системах с дипольным и РККИ-взаимодействием коллективная динамика наблюдается в тонких плёнках редкоземельных элементов ( $GdCl_3$ ,  $EuO$ ,  $Gd_{1.90}Co_{0.10}O_{3-\delta}$  и др.)<sup>5-9</sup>, материалах с кластерной структурой, образованных внедрением примесей в парамагнитные и диамагнитные решётки (H, F, N на C, Mn, V, Cr на Cu)<sup>10,11</sup>, структурами типа «спиновая лестница» (купраты)<sup>22,23</sup>, объединяемых в класс низкотемпературных парамагнетиков<sup>12</sup>. В отдельных работах исследовано формирование коллективных волн намагниченности в подсистеме ядерных спинов в условиях низких температур в сильном внешнем поле<sup>13,14</sup>. Динамика примесных магнитных центров, взаимодействующих с электронами,

---

<sup>19</sup> Мельников А.С. и др. *УФН* (2022) **192**, 1339–1384

<sup>20</sup> Chiba D. et al. *Science* (2003) **301**, 943–945.

<sup>21</sup> Prabhakar A., Stancil D.D. *Spin waves* (Springer, 2009) 348 p.

<sup>22</sup> Bonner J.C. et al. *J Appl Phys* (1979) **50**, 1810–1812.

<sup>23</sup> Vuletic T. et al. *Phys Rep* (2006) **428**, 169–258.

определяет особенности транспортных и оптических свойств композитных материалов на основе полупроводников и углерода<sup>24,25</sup>.

Анализ коллективных мод и осреднённой намагниченности даёт возможность получить описание затухания спиновой корреляции, процесс поперечной релаксации и хаотизации однокомпонентных и многокомпонентных дипольных систем на основе уравнений, полученных из микроскопического подхода<sup>2,26,27</sup>. Этот подход расширяется и на разбавленные магнитные полупроводники<sup>28</sup>, углеродные композитные материалы<sup>29</sup>. Таким образом, применение моделей коллективной динамики и приближения сплошной среды к описанию конденсированных сред даёт широкие возможности для построения динамических явлений в спиновых системах, ансамблях электронов, и их последующего исследования развитыми методами теории нелинейных колебаний и волновых процессов.

**Во второй главе** рассмотрены нелинейные волны намагниченности в низкотемпературном парамагнетике в состоянии, близком к насыщению. Гамильтониан низкотемпературного парамагнетика включает энергию Зеемана и дипольное взаимодействие:

$$\begin{aligned} \hat{H}_z &= -\omega_0 \sum_{j=1}^N S_j^z, \quad \hat{H}_{dd}^s = \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j \neq k} \frac{a_{jk}}{r_{jk}^3} \left( S_j^z S_k^z - \frac{1}{4} (S_j^+ S_k^- + S_j^- S_k^+) \right), \\ \hat{H}_{dd}^n &= \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j \neq k} \frac{1}{r_{jk}^3} (b_{jk} S_j^+ S_k^+ + 2c_{jk} S_j^+ S_k^z + h.c.), \quad \omega_0 = \gamma H_0, \\ a_{jk} &= 1 - 3 \cos^2 \theta_{jk}, \quad b_{jk} = -\frac{3}{4} \sin^2 \theta_{jk} e^{-2i\varphi_{jk}}, \quad c_{jk} = -\frac{3}{4} \sin 2\theta_{jk} e^{-i\varphi_{jk}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\gamma$  – гиромагнитное отношение;  $S$  – компоненты операторов спина;  $a_{jk}$ ,  $b_{jk}$ ,  $c_{jk}$  определяются геометрией решётки. С использованием преобразования Дайсона–Малеева<sup>30,31</sup> для спиновых операторов, в преде-

<sup>24</sup> Pappert K. et al. *Phys Rev Lett* (2006) **97**, 186402.

<sup>25</sup> Кусраев Ю.Г. *УФН* (2010) **180**, 759–773.

<sup>26</sup> de Wijn A.S., Hess B., Fine B.V. *Phys Rev Lett* (2012) **109**, 034101.

<sup>27</sup> Шутый А.М. *ЖЭТФ* (2014) **145**, 1048–1060.

<sup>28</sup> Dietl T., Ohno H. *Rev Mod Phys* (2014) **86**, 187–251.

<sup>29</sup> Rudenko A.N. et al. *Phys Rev B* (2016) **94**, 214411.

<sup>30</sup> Dyson F.J. *Physical Review* (1956) **102**, 1217–1230.

<sup>31</sup> Малеев С.В. *ЖЭТФ* (1958) **33**, 1010–1021.

ле сплошной среды построены уравнения динамики локальной намагниченности в эффективном поле решётки. В простой кубической решётке и направлении внешнего поля вдоль оси [001] их вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{M}}{dt} &= \Gamma \cdot (\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff}^s) + \Gamma_{ns} \cdot (\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff}^{ns}), \\ \mathbf{H}_{eff}^s &= \mathbf{e}_z + p_d \hat{L}\mathbf{M}, \quad \mathbf{H}_{eff}^{ns} = 3p_d \hat{D}\{M^x, -M^y, 0\}, \\ \Gamma &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & S \end{pmatrix}, \quad \Gamma_{ns} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & S \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $M^i$  – компоненты локальной намагниченности,  $p_d$  – отношение дипольной энергии к зеемановской. Операторы  $L$  и  $D$  определяют секулярную и несекулярную части дипольного взаимодействия:

$$\hat{L} = \Delta - 3 \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad \hat{D} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad \hat{Q}^\pm = \hat{L} \pm 3\hat{D}. \quad (3)$$

На основе метода многих масштабов построена цепочка уравнений на временах  $t$ ,  $T^{(1)} = p_d t$ ,  $T^{(2)} = p_d^2 t$  и т.д. Главный порядок разложения по малому параметру  $p_d$  описывает однородную прецессию:

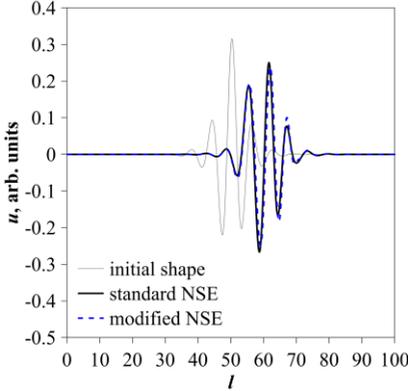
$$M^x + iM^y = (a(\mathbf{X}^{(1)}, T^{(1)}, T^{(2)}, \dots) + ic)e^{i\theta}, \quad M^z = b(\mathbf{X}^{(1)}, T^{(1)}, T^{(2)}, \dots). \quad (4)$$

В первом порядке (времена процессов  $T^{(1)} \sim T_2$ ) вблизи насыщения ( $2b \ll 1$ ) амплитуды даются линейной системой ОДУ:

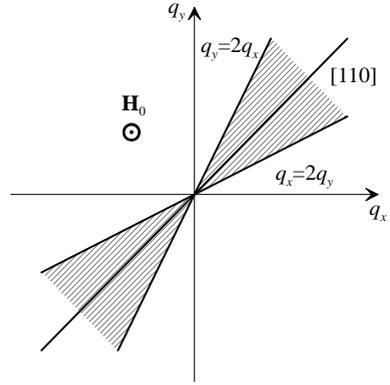
$$\frac{\partial a}{\partial T^{(1)}} \approx iP^+ c, \quad \frac{\partial c}{\partial T^{(1)}} \approx iP^- a, \quad P^\pm = \frac{S}{2} \left( (k^2 - 3k_z^2) \pm 3(k_x^2 - k_y^2) \right), \quad (5)$$

решение которой даёт поправки к ларморовской частоте, определяемые волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Суммарная намагниченность включает спектр частот шириной, пропорциональной  $p_d$ .

Второй и третий порядки разложения описывают нелинейные волны намагниченности. Во втором порядке, соответствующем времени  $T^{(2)} \sim T_2^2$  возможны решения в виде бегущих волн. Распространение локализованного начального возмущения по решётке приводит к установлению медленно меняющегося распределения намагниченности с большим пространственным масштабом.



**Рис. 1.** Численное моделирование распространения солитона поперечной намагниченности в низкотемпературном парамагнетике



**Рис. 2.** Область устойчивости волн огибающей намагниченности при учёте несекулярной части дипольного взаимодействия (заштрихована)

В третьем порядке разложения ( $T^{(2)} \sim T_2^3$ ) уравнения для амплитуд принимают следующий вид:

$$\frac{\partial M^{(x,y)}}{\partial T^{(3)}} = \mp \frac{S}{2} \hat{Q}^{\pm} M^{(y,x)} \mp \left( M^z \hat{L} M^{(y,x)} - M^{(y,x)} \hat{L} M^z \right), \quad (6)$$

$$\frac{\partial M^z}{\partial T^{(3)}} = S \left( M^x \hat{Q}^- M^y - M^y \hat{Q}^+ M^x \right).$$

Вблизи насыщения продольная компонента

$$M^z \approx (2M_s)^{-1} \left[ (M^x)^2 + (M^y)^2 \right], \quad (7)$$

т.к.  $(M^x)^2 + (M^y)^2 + (M^z)^2 = \text{const}$ . Это позволяет преобразовать (6) к системе уравнений с кубической нелинейностью, имеющей решение в виде солитона намагниченности, который распространяется вдоль оси [110] (рис. 1). Несекулярные члены ограничивают допустимые значения компонент волнового вектора солитона соотношением  $q^2 < q_x q_y / 2$  (рис. 2), тогда как без их учёта возможны любые направления.

**В третьей главе** исследованы двухкомпонентные системы, сформированные внедрением примеси в парамагнитную решётку; атомы решётки и примеси имеют разные гиромагнитные отношения. При равномерном распределении примеси, с учётом дипольного взаимодействия ионов решётки между собой и с примесью, и РККИ-взаимодействия примесных центров, в рамках реализованного выше

подхода получены уравнения эволюции намагниченности вблизи насыщения:

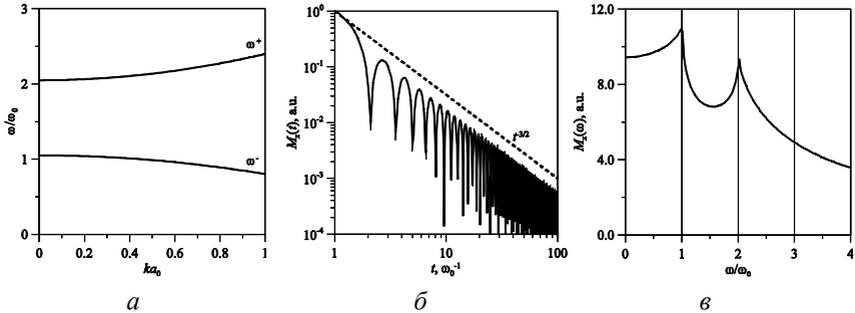
$$i \frac{\partial m}{\partial t} = (1 + 4Sa)m - Sp_d \hat{L}m + 2\sigma a M + \frac{\sigma a}{8} \Delta M + 4a |M|^2 m,$$

$$i \frac{\partial M}{\partial t} = (\gamma + 4\sigma a)M + j \Delta M + 2Sam + \frac{Sa}{8} \Delta m + 4a |m|^2 M, \quad (8)$$

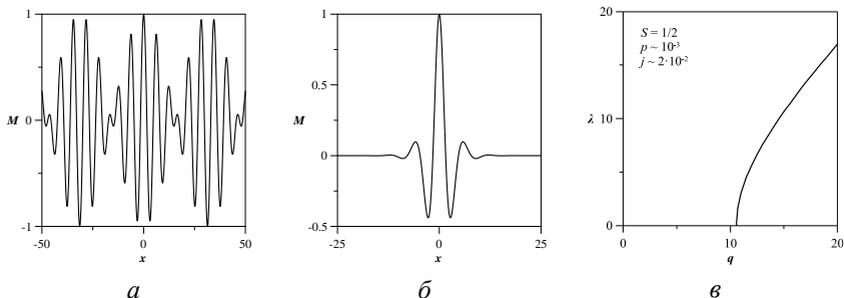
$$a = Z\gamma p_d n_s, \quad \gamma = \frac{\gamma_s}{\gamma_\sigma}, \quad p_d = \frac{\hbar \gamma_\sigma^2}{\omega_0 a_0^3},$$

где  $m$ ,  $M$  – циклические компоненты намагниченности решётки и примеси, соответственно,  $\sigma$ ,  $S$  – абсолютная величина их спинов,  $Z$  – координационное число,  $\gamma_\sigma$  и  $\gamma_s$  – гиромагнитные отношения ионов решётки и примеси;  $n_s$  – объёмная концентрация примеси;  $p_d$  и  $j$  – относительные интенсивности дипольного и РККИ-взаимодействия в системе, нормированные на энергию Зеемана;  $\Delta$  – лапласиан;  $L$  – оператор, описывающий дипольное взаимодействие (см. (5)).

Модель (8) допускает реализацию линейных волн намагниченности, спектр которых содержит две ветви, разделённые энергетической щелью, пропорциональной  $\gamma$  (рис. 3, *a*). Рассчитанный отклик на импульс радиочастотного поля (рис. 3, *б*, *в*) соответствует наличию в материале двух типов магнитных центров с разными ларморовскими частотами. Спад намагниченности для двумерной решётки при временах, больших  $T_2$ , отвечает степенному закону  $t^{-1}$ .



**Рис. 3.** Динамика линейных волн в двухкомпонентной системе: *a* – дисперсионные соотношения волн; *б* – затухание намагниченности после воздействия радиочастотного импульса; *в* – Фурье-спектр сигнала намагниченности; параметры взаимодействия  $j, p_d = 10^{-2}, \gamma = 2$



**Рис. 4.** Пространственные волны намагниченности в разбавленном магнитного композите: *a* – структура волны постоянной амплитуды; *б* – структура солитона; *в* – зависимость ширины солитона, в единицах постоянной решётки, от длины волны несущей

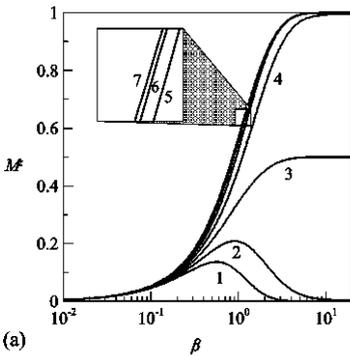
Получены также решения в виде бегущих волн постоянной амплитуды и солитонов. Первый тип реализуется в пренебрежении взаимодействием в основной решётке. Её ионы в таком случае совершают однородную прецессию, а уравнение для  $M$  допускает решение в виде бегущей волны (рис. 4, *a*). При параметрах, отвечающих материалам типа  $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$  или модифицированного графана – С, допированного Н в смеси с другими элементами, например, Li – минимальная длина волны составляет около 50 нм. Решение устойчиво при  $j > 0$ .

При условии равенства фаз волн в подсистемах решётки и примеси модель (8) имеет солитонные решения (рис. 4, *б*). Подстановка значений параметров для указанных выше материалов показывает, что в поле  $\sim 100$  Гс скорости волн  $\sim 10^{-3} \div 10^{-1}$  нм/с. Они становятся неустойчивыми, если в системе преобладает антиферромагнитный обмен ( $j < 0$ ), или при направлении между внешним полем и направлением их движения менее  $57.3^\circ$ . Устойчивы солитоны с несущей достаточно большой длины (рис. 4, *в*).

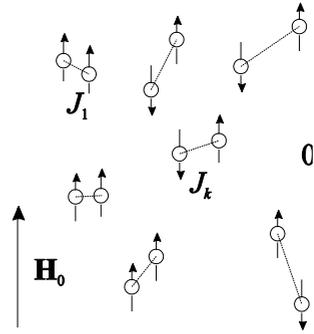
Равновесные свойства примесной подсистемы без учёта взаимодействия с основной решёткой рассмотрены на базе димерной модели. Ансамбль примесных центров разделяется на тесные пары случайного размера (рис. 5), не взаимодействующие между собой. Внутри димеров атомы, каждый из которых имеет спин  $1/2$ , связаны посредством РККИ-механизма. Димеры имеют 4 собственных состояния, образующие синглет со спином  $S = 0$  и триплет со спином  $S = 1$ . Рассмотрены случаи, когда случайная энергия взаимодействия внутри пар рас-

пределена по нормальному закону со средним  $J_0$ , либо размер димеров распределён по логнормальному закону.

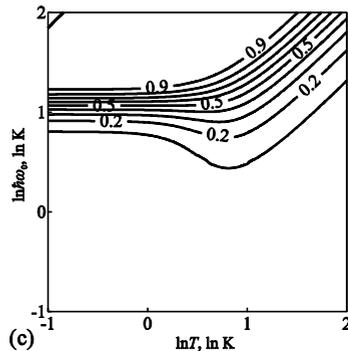
При высоких температурах система димеров является парамагнетиком и подчиняется закону Кюри, при низких – равновесная намагниченность определяется  $J_0$ . Если  $J_0 > 0$ , намагниченность достигает насыщения; при  $J_0 < 0$  она падает до нуля, поскольку в этом случае преобладают димеры с противоположной ориентацией магнитных моментов частиц. В промежуточной области температур с ростом дисперсии энергии взаимодействия возрастает доля димеров в синглетных состояниях, и происходит спад полной намагниченности относительно функции Бриллюэна (рис. 6). Граница области существования немагнитного состояния и перехода в парамагнитную фазу размывается пропорционально дисперсии распределения энергии РККИ-взаимодействия или размера димеров (рис. 7).



**Рис. 6.** Намагниченность димерной системы при значении безразмерного параметра дисперсии 0.5 и значениях средней энергии  $J_0$ : 1 – (-3.0); 2 – (-2.0); 3 – (-1.0); 4 – 0.0; 5 – 1.0; 6 – 2.0; 7 – 3.0



**Рис. 5.** Схематическое изображение системы димеров под воздействием внешнего поля



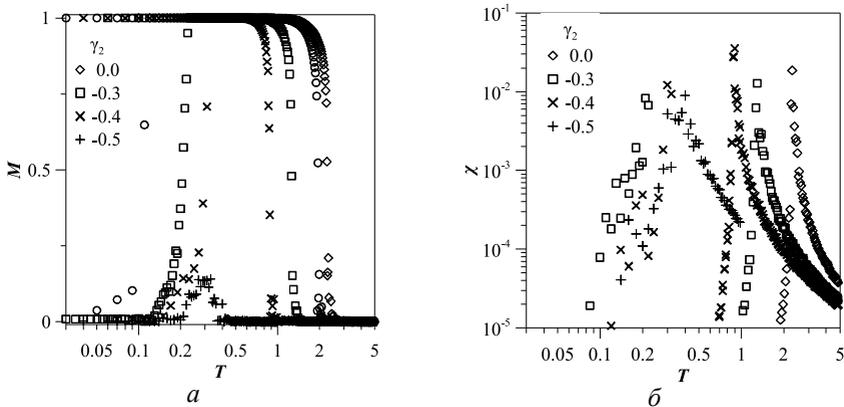
**Рис. 7.** Намагниченность димерной системы при средней энергии взаимодействия в парах  $J_0 = -1.0$  мЭВ и дисперсии 0.5 мЭВ: немагнитное состояние при низких температурах и слабом поле

Для концентрированной системы с учётом взаимодействия в первой и второй координационной сферах проведено численное моделирование на базе модели Изинга:

$$\hat{H} = -J_0 \left[ \sum_{\langle j \neq k \rangle} \sigma_j \sigma_k + \gamma_2 \sum_{\langle\langle j \neq k \rangle\rangle} \sigma_j \sigma_k + \dots \right], \quad (9)$$

где  $\sigma_j = \pm 1$ ,  $J_0$  – обменное взаимодействие ближайших соседей,  $\gamma_2$  – нормированное на  $J_0$  взаимодействие во втором порядке. Расчёты выполнены на решётке размером  $128 \times 128$  ячеек с периодическими граничными условиями методом Метрополиса, намагниченность и внутренняя энергия системы найдены с точностью не хуже 10 %.

При  $J_0 > 0$  и  $\gamma_2 > 0$  температура  $T_c$  перехода «ферромагнетик – парамагнетик» возрастает по сравнению со значением  $T_c \approx 2.27$ , отвечающим  $\gamma_2 = 0$ , качественных изменений не происходит. При  $\gamma_2 < 0$   $T_c$  снижается (рис. 8), в области низких температур возникает метастабильное состояние с малой намагниченностью. Температура перехода между ним и состоянием насыщения возрастает по мере усиления АФМ-вклада. При  $\gamma_2 \approx -0.54$  насыщение становится недостижимым.



**Рис. 8.** Рассчитанные для модели Изинга на квадратной решётке с ФМ взаимодействием ближайших соседей и АФМ взаимодействием во второй координационной сфере температурные зависимости:  $a$  – намагниченности,  $b$  – магнитной восприимчивости без внешнего поля

АФМ взаимодействие разбивает решётку на домены с противоположными намагниченностями. Их размер увеличивается с ростом температуры, пока энергия системы не совпадёт с энергией однород-

ного состояния насыщения. Далее усиление флуктуаций разрушает доменную структуру. Средний размер доменов оценивается из минимума суммарной энергии:

$$\rho^* = \left[ \frac{J_0 \lambda}{2M^2} \left( 1 + \frac{\gamma_2 Z_2}{2} \right) \right]^{2/3}, \quad (10)$$

где  $Z_2$  – второе координационное число,  $M$  – равновесная намагниченность,  $\rho = n/N$  – относительный размер доменов, включающих в среднем  $n$  узлов решётки,  $\lambda \sim 4/N^{1/2}$  – характеристика периметра доменов. Система переходит в парамагнитную фазу при  $\rho = 0$ , что даёт  $\gamma_{2,crit} \sim -2/Z_2$ . На квадратной решётке это равно  $-0.5$  и согласуется со найденным численно значением. При  $J_0 < 0$  метастабильное состояние не реализуется.

**В четвёртой главе** приведены результаты численного моделирования намагниченности систем с большим числом частиц посредством сложения сигналов от невзаимодействующих спиновых кластеров малой размерности. Проведено моделирование свойств сферических углеродных оболочек и неупорядоченных систем. Численный алгоритм основан на расчёте уровней энергии путём диагонализации матрицы гамильтониана (1) и расчётом волновой функции, в начальный момент отвечающей насыщению в поперечном направлении<sup>32</sup>.

Основным элементом системы магнитных центров на поверхности сферической оболочки принят кольцевой кластер заданного радиуса. Моделирование выполнено для кластеров из 6–12 частиц, плоскость колец ориентировалась под различными углами относительно внешнего поля, полученные сигналы осреднялись. Результат этого демонстрирует типичные сигналы затухания поперечной намагниченности (рис. 9) со временем релаксации, связанным с размером кластера. Огибающие намагниченности для колец, ориентированных ортогонально полю, описываются пробными функциями Абрагама. Для разных радиусов кольцевого кластера:

$$F(t) = \exp\left(-\frac{a^2 t^2}{2R^3}\right) \frac{\sin(bt / R^3)}{(bt / R^3)}. \quad (11)$$

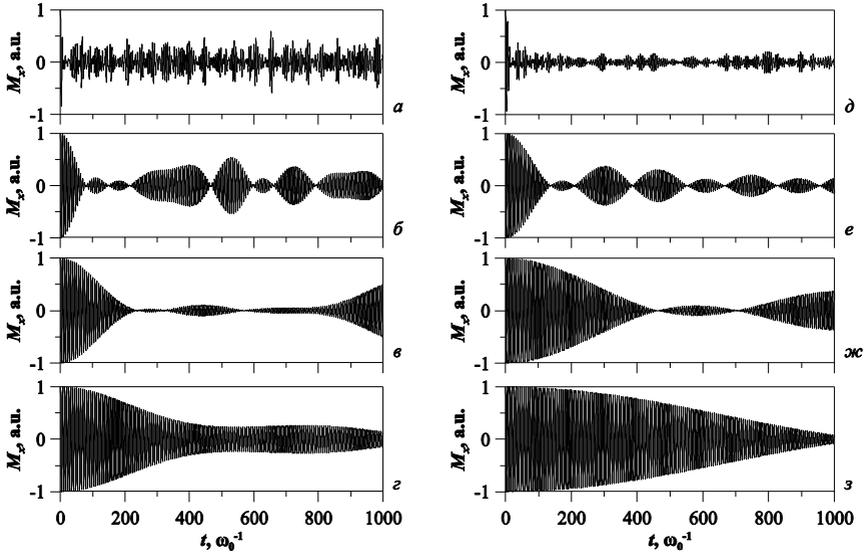
Оценка для трёхмерного спинового кластера с использованием в качестве опорного параметра его объёма даёт

---

<sup>32</sup> Henner V.K. et al. *Appl Magn Reson* (2021) **52**, 859–866

$$F(t) = \exp\left(-\frac{a^2 t^2}{2V^2}\right) \frac{\sin(bt/V)}{(bt/V)}. \quad (12)$$

Параметры  $a$ ,  $b$  вычисляются по известным из литературы выражениям для второго и четвёртого моментов магниторезонансного спектра дипольной системы. Отношение  $M_4/M_2^2$  составляет 2.06 для ортогонального поля и 1.50 – для параллельного. Затухание суммарного сигнала системы кластеров происходит монотонным образом (рис. 10).



**Рис. 9.** Рассчитанные зависимости поперечной намагниченности для кольцевого спинового кластера из 8 частиц безразмерным радиусом  $R$ :  $a, д - 0.5$ ;  $б, е - 1.0$ ;  $в, ж - 1.5$ ;  $г, з - 2.0$ ; слева – кольца, плоскость которых ортогональна внешнему полю, справа – параллельна ему

Функция (11) при осреднении по  $R$  даёт спад, близкий к гауссову, и оценку безразмерного времени релаксации  $t_r \sim (2R^3)^{1/2}$ , что согласуется с численным моделированием. Осреднение (12) применено к кластерам из 8 частиц со спином  $1/2$ , расположенных в вершинах кубов случайного размера при различной дисперсии распределения; объём куба 1.0 соответствует  $p_d = 10^{-2}$ , (рис. 11). С ростом дисперсии осциллирующий сигнал намагниченности переходит к монотонному затуханию, ограниченному функцией  $t^{-1}$  (рис. 12).

Суммирование сигналов намагниченности, соответствующих случайным пространственным распределениям малого числа частиц, эффективно подходом для моделирования динамики неупорядоченной системы с большим числом частиц.

Вклад каждой пары частиц в полную намагниченность содержит медленные гармоники вида  $\exp(ip_d t)$ . Их осреднение по параметру взаимодействия  $p_d$  даёт колебания, амплитуда которых затухает пропорционально  $\sim t^{-1}$ .

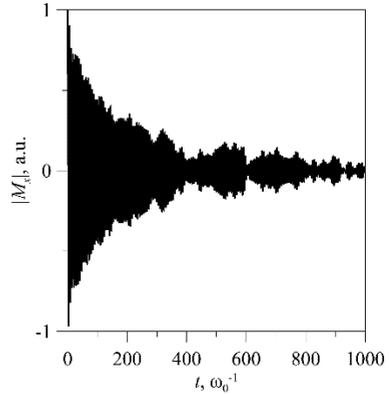


Рис. 10. Суммарная намагниченность модели сферической оболочки

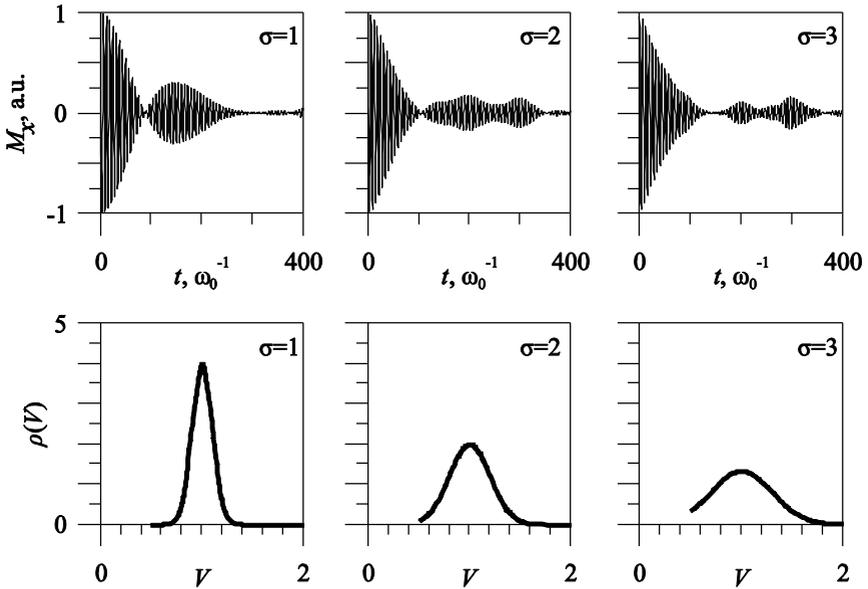
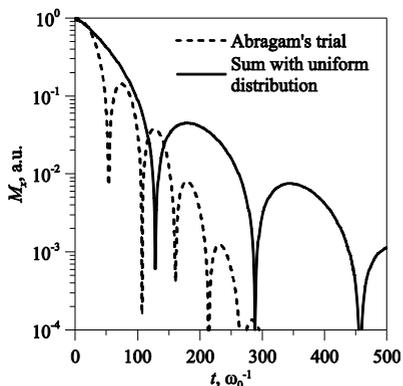
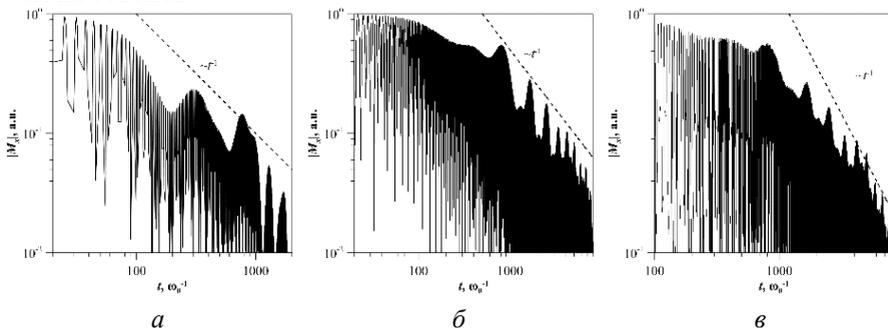


Рис. 11. Смоделированные сигналы ССИ (верхний ряд) для нормального распределения размера кластеров (нижний ряд) при значениях стандартного отклонения  $\sigma = 1, 2$  и  $3$



**Рис. 12.** Сравнение ССИ для однородной системы и суммарного сигнала, рассчитанного для ансамбля кубических спиновых кластеров с равномерным распределением их объёмов

Выполнены серии расчётов динамики намагниченности для магнитных кластеров, состоящих из 7, 8 и 9 частиц со спином  $1/2$ , случайным образом расположенных на дискретной пространственной сетке размерами  $3 \times 3 \times 3$ ,  $5 \times 5 \times 5$  и  $7 \times 7 \times 7$  узлов, а также в сплошной среде. Промоделировано по 1000 случайных реализаций, характерное значение интенсивности взаимодействия принято равным  $10^{-2}$ . Результаты моделирования разреженных структур подтверждают полученное аналитически ограничение затухания по закону  $t^{-1}$  (рис. 13).



**Рис. 13.** Сигналы поперечной намагниченности, осреднённые по случайным конфигурациям 8 частиц, расположенным на дискретной сетке: *а*) –  $3^3$ ; *б*) –  $5^3$ ; *в*) –  $7^3$ ; пунктир – зависимость  $t^{-1}$

**Во пятой главе** рассматривается реализация линейных спиновых волн в низкотемпературном парамагнетике в сильном внешнем поле в состоянии, близком к насыщению. В пренебрежении взаимодействием спиновых волн вычислены спектры коллективных мод намагниченности для следующих структур: простая кубическая решётка; двумерные квадратная и гексагональная решётки; кольцевой спиновый кластер конечной размерности, линейная цепочка частиц.

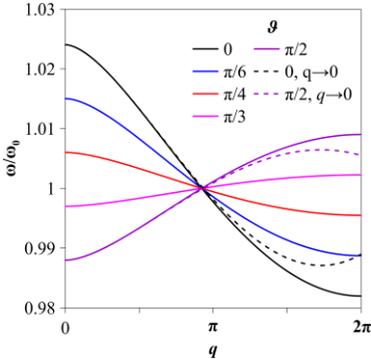
Для двумерных решёток в ортогональном поле минимум энергии спиновых волн соответствует длинноволновому пределу. В трёхмерной решётке длинноволновым возбуждениям соответствует седловая точка в части дисперсионного соотношения, отвечающей ближнему радиусу взаимодействия, и в этом случае значимый вклад вносят дальнедействующие слагаемые:

$$\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_0} = 1 - Sp_d \left( 2 \cos k_z a_0 - \cos k_x a_0 - \cos k_y a_0 + \frac{1}{2} \left( \frac{k_z^2}{k^2} - \frac{1}{3} \right) \right) + \dots, \quad (13)$$

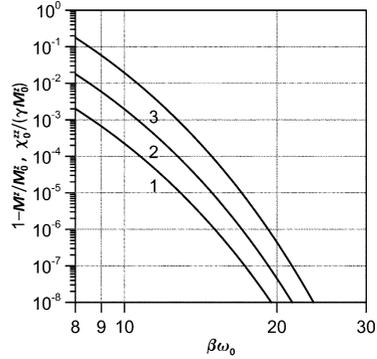
Дальнедействие корректирует значение эффективного поля и зеемановской энергии системы. В одномерной цепочке возможен учёт взаимодействий на всех расстояниях (рис. 14), дисперсионное соотношение в этом случае даётся рядом:

$$\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_0} = 1 + 2p_d S(1 - 3\cos^2 \theta) \left[ 1 - \sum_n \frac{\cos qn}{n^3} \right]. \quad (14)$$

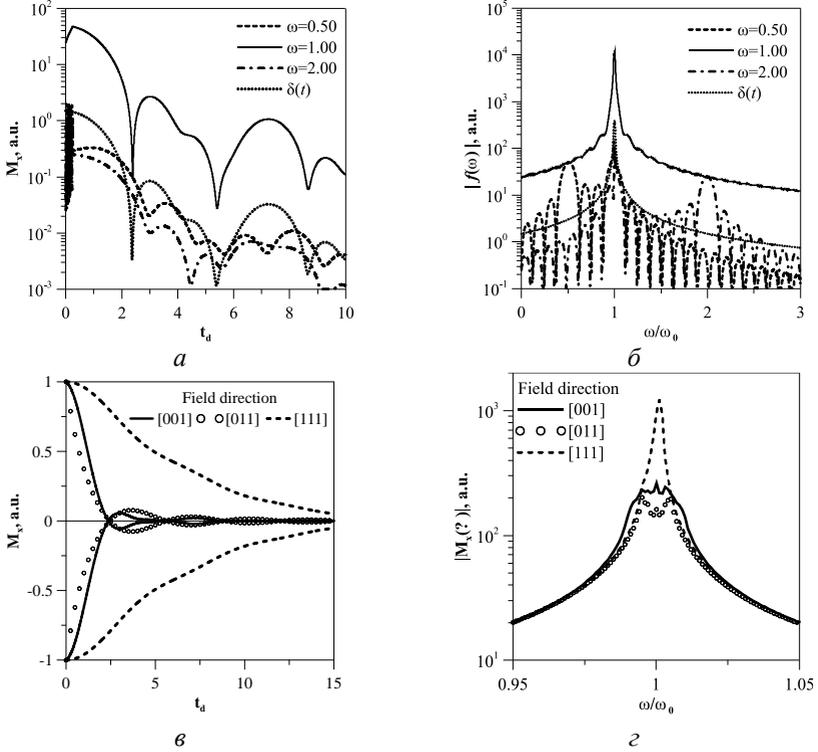
Для двумерных конфигураций рассчитана низкотемпературная равновесная намагниченность, восприимчивость и теплоёмкость магнетика. Их экспоненциальная зависимость от температуры (рис. 15) обусловлена локализацией спектра (13) вблизи  $\omega_0$ .



**Рис. 14.** Дисперсионные соотношения линейных волн намагниченности одномерной цепочки при полном учёте всех радиусов взаимодействия, различных углах поворота цепочки относительно внешнего поля, и значении  $p_d = 10^{-2}$



**Рис. 15.** Температурная зависимость отклонения намагниченности от насыщения и статической продольной восприимчивости дипольного парамагнетика в спин-волновом режиме при энергии взаимодействия  $p_d$ : 1 -  $10^{-2}$ , 2 -  $10^{-3}$ , 3 -  $10^{-4}$

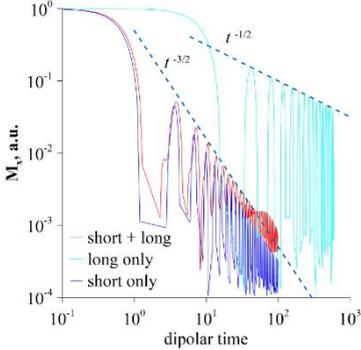


**Рис. 16.** Отклик парамагнетика с простой кубической решёткой на возмущения магнитного поля в спин-волновом режиме: а) – огибающая поперечной намагниченности и б) – её Фурье-спектр, после воздействия прямоугольного радиочастотного или дельта-образного импульса; в), г) – то же, после скачкообразного изменения продольного поля; частота измеряется в единицах ларморовской, время – в дипольных единицах  $pd$

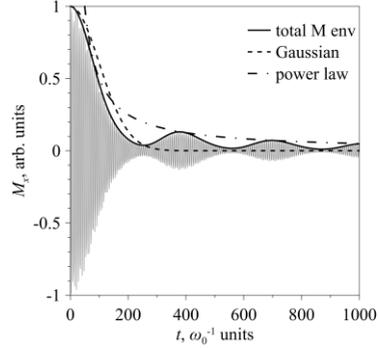
На базе теории линейного отклика найдена динамика намагниченности дипольной решётки под воздействием возмущений внешнего поля (рис. 16). Дисперсионное соотношение спиновых волн позволяет найти закон затухания намагниченности на больших временах (рис. 17):

$$M^x(t) \propto \int d^3\mathbf{k} e^{\pm i\omega_{\mathbf{k}}t} \sim \begin{cases} t^{-3/2}, & k \neq 0, \\ t^{-1/2}, & k \rightarrow 0. \end{cases} \quad (15)$$

Спад по закону  $t^{-3/2}$  отвечает диффузионному процессу; при наличии только длинноволновых мод происходит переход к затуханию по закону  $t^{-1/2}$ . В одномерных и двумерных системах дипольное слагаемое можно рассматривать как короткодействующее, что даёт  $M^x \sim t^{-1/2}$  и  $t^{-1}$ , соответственно.



**Рис. 17.** Модельный сигнал намагниченности трёхмерной дипольной системы в спин-волновом режиме при учёте и без учёта дальнедействующих вкладов взаимодействия



**Рис. 18.** Начальный гауссов спад и степенная асимптотика поперечной намагниченности в системе случайно ориентированных кольцевых кластеров

На рис. 18 показан отклик на короткий импульс ансамбля кольцевых спиновых кластеров со случайными ориентациями. Сигналы отдельных кольцевых структур пропорциональны функции Бесселя и затухают при  $t > T_2$  как  $t^{-1/2}$ . Суммарная намагниченность ансамбля, рассчитанная численным интегрированием, затухает по закону  $t^{-1}$ :

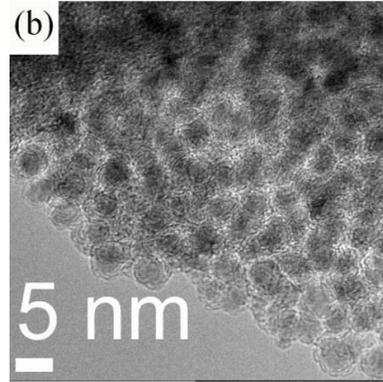
$$M_{\Sigma}^x(t) \sim \int_0^{\pi/2} d\vartheta \sin \vartheta J_0 \left( \frac{\sqrt{s(s+1)}}{2} \left( 1 - \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta \right) p_d t \right) \sim (p_d t)^{-1}. \quad (16)$$

Эти зависимости реализуются и для одномерной цепочки.

Таким образом, для низкотемпературного парамагнетика вблизи состояния насыщения получены дисперсионные соотношения спиновых волн в различных решётках, вычислены спин-волновые вклады в намагниченность и теплоёмкость и отклики намагниченности на переменное поле. Спектр волн занимает узкую полосу частот вблизи ларморовской, его ширина пропорциональна интенсивности взаимодействия.

**В шестой главе** описываются транспортные, магнитные и оптические свойства сферических углеродных наноболочек.

В совместных работах с коллективом кафедры нанотехнологий и микросистемной техники ПГНИУ и ун-том г. Луисвилль (США) отработана техника синтеза многослойных углеродных оболочек на поверхности наночастиц Ni, Co и Fe посредством термоллиза органического прекурсора. При температурах до 600 °С средний диаметр металлических частиц лежит в интервале 2÷5 нм, они не выходят из стадии нуклеации. Увеличение температуры синтеза приводит к процессу переконденсации, и частицы достигают диаметра 50÷100 нм. Последующее травление кислотой позволяет получить массив пустотелых углеродных оболочек случайного размера (рис. 19), осаждение на их поверхности примесей является эффективным способом контроля электронных и магнитных свойств материала. Ввиду случайности размера оболочек, для описания их массива разработана модель на основе приближения сплошной среды.



**Рис. 19.** Микрофотография синтезированного образца сферических углеродных наноболочек с включениями Ni (затемнения в центрах)

Электроны в оболочке описываются гамильтонианом Хаббарда:

$$\hat{H} = -t \sum_{j, \delta, \sigma} \left( a_{j\sigma}^\dagger b_{j+\delta, \sigma} + b_{j\sigma}^\dagger a_{j-\delta, \sigma} \right) + U \sum_j \left( n_{j\uparrow}^a n_{j\downarrow}^a + n_{j\uparrow}^b n_{j\downarrow}^b \right) - \rho \Delta \sum_{j, \sigma} \left( a_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + d_{j\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + b_{j\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + f_{j\sigma}^\dagger b_{j\sigma} \right), \quad (17)$$

где  $a, b$  – операторы электронной плотности на двух подрешётках углерода,  $n^x = X^\dagger X$  – операторы числа электронов,  $\sigma$  – спин электрона,  $j$  – номер узла,  $d, f$  – операторы электронной плотности на ионах примеси,  $\delta$  – радиус-векторы от  $j$  к ближайшим соседям,  $t, U$  – параметры модели Хаббарда,  $\Delta$  – матричный элемент перехода между примесью и узлами решётки,  $\rho$  – концентрация примеси.

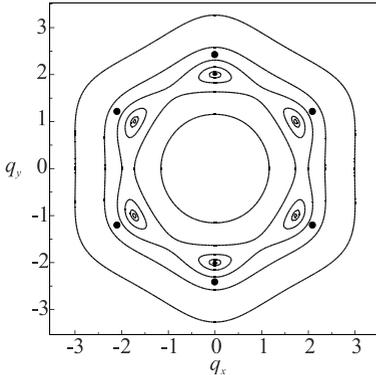
Переход к пределу сплошной среды с учётом среднего поля для  $U$ -членов в первом неисчезающем приближении приводит к системе

$$\begin{aligned} i \frac{da_\sigma}{dt} &= -tZ \left( 1 + \frac{a_0^2}{2} \nabla^2 \right) b_\sigma - \rho \Delta d_\sigma + U \langle n_{-\sigma} \rangle a_\sigma, \\ i \frac{db_\sigma}{dt} &= -tZ \left( 1 + \frac{a_0^2}{2} \nabla^2 \right) a_\sigma - \rho \Delta f_\sigma + U \langle n_{-\sigma} \rangle b_\sigma, \\ i \frac{dd_\sigma}{dt} &= -\rho \Delta a_\sigma, \quad i \frac{df_\sigma}{dt} = -\rho \Delta b_\sigma, \end{aligned} \quad (18)$$

здесь  $a_0$  – длина межатомной связи. В плоской геометрии решение в виде плоских волн имеет дираковский спектр при учёте третьего порядка разложения операторов  $a$ ,  $b$  в ряд Тейлора (рис. 20). Это верифицирует модель (18).

В сферической геометрии рассчитанный энергетический спектр является дискретным с высокой кратностью вырождения уровней:

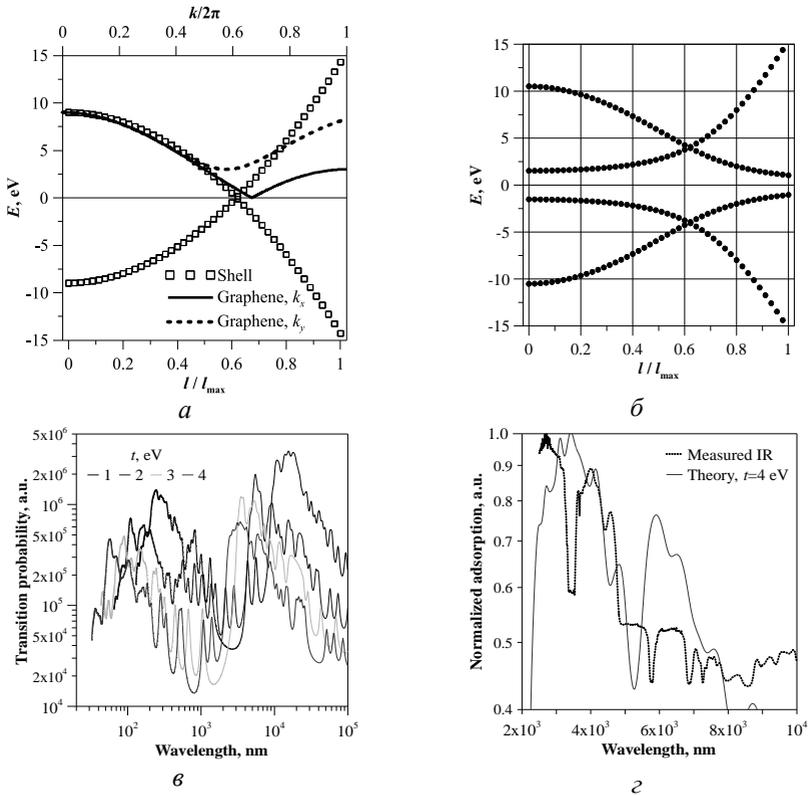
$$\begin{aligned} E_{l,\sigma} &= \frac{1}{2} (U \langle n_{-\sigma} \rangle \pm \gamma) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(U \langle n_{-\sigma} \rangle \pm \gamma)^2 + 4(\rho \Delta)^2}, \\ \gamma &= tZ \left( 1 - \frac{a_0^2 l(l+1)}{2R^2} \right), \quad l_{max} \sim \sqrt{\frac{16}{3} \frac{R}{a_0}} - 1, \end{aligned} \quad (19)$$



**Рис. 20.** Изолинии энергии электронов в приближении сплошной среды; точками обозначены положения конусов Дирака в графене

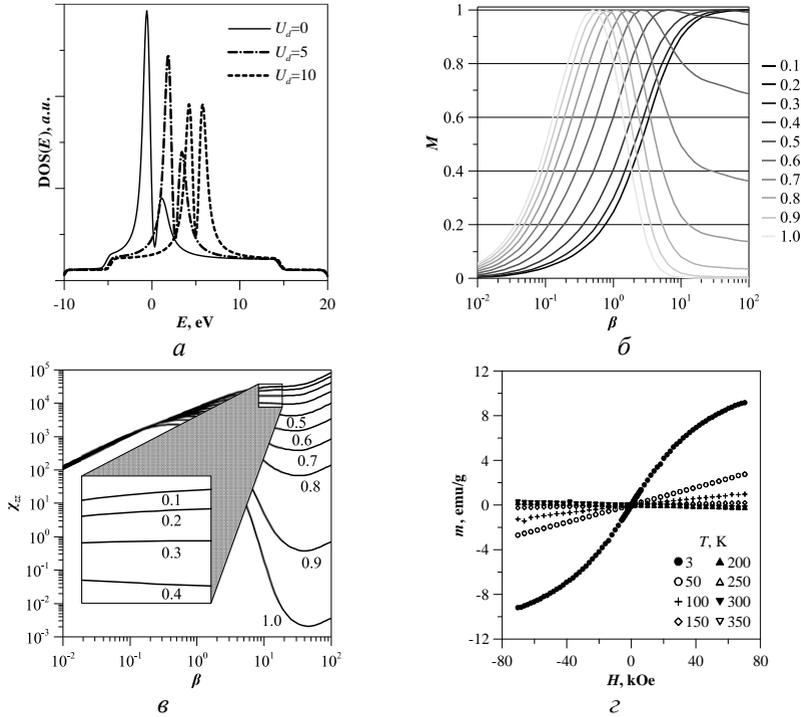
квантовое число  $l$  ограничено сверху. Для оболочек радиусом  $2 \div 3$  нм это даёт оценки числа узлов  $\sim 9 \cdot 10^2 \div 2 \cdot 10^3$  и  $l_{max} \sim 29 \div 45$ .

На рис. 21 показаны примеры рассчитанного энергетического спектра при различной концентрации примеси, и вычисленный при различных значениях параметра  $t$  спектр оптического поглощения, структура которого в ближней ИК-области соответствует эксперименту и позволяет оценить эффективное значение  $t$  в сферической структуре.



**Рис. 21.** Энергетические уровни электронов в углеродной оболочке при  $R/a_0 = 20$ ,  $t = 3$  эВ,  $U = 0$  эВ, концентрация примеси:  $a - 0.0$ ;  $b - 0.8$ ; спектр оптического поглощения:  $\delta -$  расчёт при различных  $t$ ;  $\epsilon -$  сопоставление с экспериментом в ближней ИК-области

По плотности состояний электронов рассчитаны намагнитченность и восприимчивость, связанные с механизмом Паули. При низких температурах существенный вклад в парамагнетизм вносят степень функционализации и кулоновское отталкивание (рис. 22). Оценка диамагнитной восприимчивости на модели кольцевых токов показывает, что она всегда преобладает над парамагнетизмом; величина согласуется с результатами измерений. При температуре ниже 200 К изученные образцы имеют парамагнитные свойства, что связано с попаданием примесей (кислорода) и неполным вытравливанием металлических наночастиц.



**Рис. 22.** Свойства углеродной оболочки: *а*) – функция плотности электронных состояний; *б*) – намагниченность, *в*) – восприимчивость при различной степени функционализации оболочки, рассчитанные при  $t = 3$  эВ,  $U = 10$  эВ; *з*) – измеренные при различных температурах полевые зависимости намагниченности образца углеродных оболочек

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Подход на основе коллективных мод применён к уравнениям динамики отдельных магнитных моментов в концентрированной системе частиц с дипольным или РККИ-взаимодействием в пределе сплошной среды, и сформулированы уравнения эволюции суммарной намагниченности системы, описывающие спин-спиновую релаксацию и спиновую диффузию в сильном внешнем поле вблизи состояния насыщения без введения эмпирических параметров. Существует единая иерархия динамических явлений: дипольное уширение соответствует процессам со временем  $T_2$ , формирование не-

линейных волн на временах  $T_2^2$ , солитонов – на масштабе  $T_2^3$  и больших. Область устойчивости волн намагниченности ограничена несекулярными членами дипольного взаимодействия.

2. На базе приближения сплошной среды сформулирована динамическая модель динамики намагниченности двухкомпонентного материала, состоящего из парамагнитной решётки с равномерно внедрёнными в неё примесями с другим гиромагнитным отношением, с учётом дипольного взаимодействия атомов основной решётки между собой, с атомами примеси, и РККИ-взаимодействия примесных центров. Реализуются связанные колебания и волны намагниченности в подсистемах. Возможна реализация солитонов, устойчивых при положительном знаке взаимодействия ближайших атомов примеси, и значении угла между внешним полем и направлением движения, меньшим  $\arccos(1/3^{1/2}) \approx 57.3^\circ$ .
3. В системе, образованной тесными магнитными димерами с РККИ-взаимодействием внутри пар частиц, со случайной величиной взаимодействия или размером димеров, возможна реализация немагнитной фазы, обусловленной переходом части димеров в микросостояния с нулевым полным спином. Это приводит к отклонению равновесной намагниченности системы ансамбля от ожидаемой для парамагнетика зависимости, заданной функцией Бриллюэна. Область существования немагнитного состояния расширяется при увеличении дисперсии распределения энергии взаимодействия в димерах или их размера. Аналогичное немагнитное состояние для концентрированной системы найдено численно для модели Изинга с конкурирующими знаками обменного взаимодействия в первой и второй координационной сферах.
4. Аналитически и численно проведено осреднение пробных функций Абрагама, описывающих огибающие сигналов поперечной намагниченности элементов ансамбля спиновых кластеров случайного размера с заданной функцией распределения, продемонстрирован переход от осциллирующих сигналов суммарной намагниченности к монотонному спаду  $M_x \sim (t/T_2)^{-1}$ . Для ансамбля кластеров случайной структуры реализуется такая же зависимость.
5. С использованием спин-волнового подхода реализовано описание намагниченности дипольной системы вблизи насыщения в сильном внешнем поле. Спектр коллективных мод локализован вблизи лар-

моровской частоты, что определяет экспоненциальное убывание их вкладов в намагничённость и теплоёмкость при низких температурах. В рамках теории линейного отклика смоделирована динамика намагничённости системы под влиянием возмущений внешнего поля. На временах до  $T_2 \sim 1/p_d$  наблюдается релаксация, обусловленная расфазировкой спиновых мод. На больших временах поперечная намагничённость в спин-волновом режиме затухает как  $t^{-d/2}$ , где  $d$  – размерность решётки. Найденная зависимость отвечает экспериментальным и теоретическим данным о спиновой динамике и спиновой диффузии в ансамблях NV-центров и одномерных спиновых цепочках с анизотропными взаимодействиями.

6. Реализация приближения сплошной среды к уравнениям эволюции операторов электронной плотности, полученных из модели Хаббарда для сферической углеродной оболочки с примесями, позволяет рассчитать энергетический спектр углеродной структуры. Найденный спектр оптического поглощения массива нанооболочек случайного размера согласуется с экспериментальными данными ИК-спектроскопии. В совокупности с измерениями проводимости он позволяет оценить осреднённые транспортные свойства системы. Получена оценка ширины запрещённой зоны, описан электронный пара- и диамагнетизм сферической оболочки, оценки подтверждены экспериментально.

Результаты работы демонстрируют существенный вклад коллективной спиновой динамики в равновесные и динамические характеристики одно- и многокомпонентных материалов с дипольным и РККИ-взаимодействием. Реализовано систематическое применение приближения сплошной среды к описанию коллективных явлений в магнитных и проводящих материалах, мезоскопических спиновых системах.

## ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. **Tsiberkin K. B.** Collective spin excitations in 2D paramagnet with dipole interaction // *European Physical Journal B.* – 2016. – Vol. 89 (2), 54.
2. **Цибержкин К. Б.** Нелинейные волны и солитоны намагничённости в парамагнетике с дипольным взаимодействием // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 2018. – Т. 154. – № 6 (12). – С. 1151–1159.

3. **Tsiberkin K. B.**, Belozerova T. S., Henner V. K. Simulation of free induction decay at low-temperature with spin waves and classical spins // *European Physical Journal B.* – 2019. – V. 92, 140.
4. Rudakov G. A., **Tsiberkin K. B.**, Ponomarev R. S., et al. Magnetic properties of transition metal nanoparticles enclosed in carbon nanocages // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* – 2019. – V. 427. – P. 34–39.
5. **Tsiberkin K.**, Strunina Y. Magnetism of dimer ensemble with random exchange energy // *European Physical Journal B.* – 2021. – Vol. 94, 21.
6. **Tsiberkin K. B.** Magnetization wave dynamics within a diluted magnetic semiconductor // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* – 2021. – Vol. 523, 167596.
7. **Цибержкин К. Б.** Волновая динамика намагниченности ферромагнитной примеси в парамагнитной матрице // *Физика металлов и металловедение.* – 2021. – Т. 122, № 4. – С. 384–387.
8. **Tsiberkin K. B.** Continuum model of free induction decay in diluted magnetic composite // *Applied Magnetic Resonance.* – 2021. – Vol. 52 – P. 867–877.
9. **Цибержкин К. Б.** Моделирование энергетического спектра углеродной сферы в пределе сплошной среды // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 2022. – Т. 162, вып. 6 (12). – С. 968–974.
10. **Tsiberkin K. B.** Averaging of the free induction decay from an ensemble of small spin clusters // *European Physical Journal B.* – 2023. – V. 96, 70.
11. **Цибержкин К. Б.**, Сосунов А. В., Целиков Г. И. Исследование спектра поглощения углеродных наносфер // *Оптика и Спектроскопия.* – 2023. – Т. 131, вып. 8. – С. 1118–1122.
12. **Tsiberkin K. B.** Verification of continuum-based model of carbon materials // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics.* – 2023. – V. 14 (5). – P. 539–543.
13. **Tsiberkin K.**, Kovycheva E. Spin-wave model of free induction decay in ring spin cluster // *Applied Magnetic Resonance.* – 2024. – V. .55 – P. 565–574.

14. **Tsiberkin K. B.** Magnetization dynamics of a linear dipole chain with accounting for all-to-all interactions // *Physica B.* – 2025. – Vol. 702, 417016.
15. **Tsiberkin K. B.**, Sosunov A. V., Govorina V. V., Neznakhin D. S., Henner V. K., Sumanasekera G. Magnetic properties of carbon nanocages: pure and with the Ni or Co inclusions // *Solid State Sciences.* – 2025. – Vol. 162, 107862.
16. Сосунов А. В., **Циберкин К. Б.**, Хеннер В. К. Влияние функционализации углеродных нанооболочек на их электрические свойства // *Вестник Пермского Университета. Физика.* – 2019. – № 2. – С. 63–68.
17. **Циберкин К. Б.** Низкотемпературный антиферромагнетизм в модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями // *Вестник Пермского Университета. Физика.* – 2021. – № 2. – С. 64–71.
18. Ковычева Е. И., **Циберкин К. Б.** Магнитный резонанс сферических и кольцевых спиновых кластеров // *Вестник Пермского университета. Физика.* – 2022. – № 2. – С. 26–35.
19. **Циберкин К. Б.** Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016661950 «SpinChainLevels» // *Роспатент* – 2016.

---

Подписано в печать \_\_.\_\_.20\_\_

Формат 60×84/16.

Усл. печ. л. х,хх. Тираж 100 экз. Заказ

Отпечатано в типографии Издательского центра Пермского государственного  
национального исследовательского университета.

614068, г. Пермь, ул. Букирева, 15.