ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/19

**ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ КЛАСТЕРОВ НИЖНЕГО
ИЕРАРХИЧЕСКОГО УРОВНЯ НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА**

¹Насибуллин Р.Т., ²Квеглис Л.И., ¹Черепанов В.Н., ¹Нявро А.В.

¹НИ Томский Государственный университет, Томск, Россия

²Восточно-Казахстанский Государственный университет, Республика Казахстан
karacique@gmail.com, kveglis@list.ru, vnch@phys.tsu.ru, nerv@phys.tsu.ru

Анализ экспериментальных данных нанокластерных образований никелида титана ($\text{Ni}_{51}\text{Ti}_{49}$), полученных в результате лазерной абляции [1], а также при термическом и механическом воздействии [2] показал, что в данных структурах никель-титановых сплавов наблюдается появление эффекта намагниченности. В связи с этим нами были рассмотрены кластерные структурные модели (FK-12) первого уровня, поскольку последующие уровни кластеризации основываются на предыдущих уровнях.

Проведены теоретические расчеты в рамках теории функционала плотности, позволяющие объяснить появление намагниченности в кластерных структурах никелида титана ($\text{Ni}_{51}\text{Ti}_{49}$), заключающуюся в том, что каждый кластер представляет из себя микродомен имеющий ненулевой магнитный момент, который и обуславливает появление результирующего магнитного момента в кластерной структуре сплава $\text{Ni}_{51}\text{Ti}_{49}$ подвергнутому внешнему воздействию.

Для расчета намагниченности никелида титана рассмотрены кластерные структурные модели первого уровня. Показано, что намагниченность сплава $\text{Ni}_{51}\text{Ti}_{49}$ определяется не только координационным числом ближайшего атомного окружения, но и координатами атомов разных сортов в первой координационной сфере.

В случае наибольшей энергии кластеризации, которая соответствует наиболее симметричному расположению атомов на поверхности кластера FK-12, расчёт дает максимальное значение величины его магнитного момента.

Также для сравнения был проведен расчет магнитных свойств кластера Ni_7Ti_6 (I) методом РВ с оптимизированной геометрией. Результаты данных расчетов качественно согласуются между собой: в обоих случаях расчет магнитных моментов и плотностей электронных состояний для кластера FK-12 Ni_7Ti_6 (I) показывает появление намагниченности ферромагнитного типа.

Литература

1. A K Drozdova, V N Cherepanov, V A Svetlichny, L I Kveglis, M N Volochaev and D A Velikanov, Structure and magnetic properties of titanium nickelide nanoparticles synthesized by pulsed laser ablation method // 2017. – 13th international conference on films and coatings.
2. Квеглис Л. И., Носков Ф. М., Волочаев М. Н., Джес А. В. Мартенситные превращения в никелиде титана через промежуточную фазу с ГЦК-решеткой // Физ. мезомех. – 2016. Т. – 19. – № 2. – С. 100-107.