

ВЛИЯНИЕ ПОЛИДИСПЕРСНОСТИ НА РАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛИМЕРОВ

Беляева Т.Д.*, Новак Е.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: mizgireva96@outlook.com

THE INFLUENCE OF POLYDISPERSITY ON THE EQUILIBRIUM PROPERTIES OF SUPRAMOLECULAR MAGNETIC POLYMERS

Belyaeva T.D.* , Novak E.V.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Annotation. This paper is devoted to the study of the polydispersity effect on the self-assembly of supramolecular magnetic polymers. With the help of Langevin dynamics simulations we study the various structure parameters of a single magnetic polymer of different conformations: closed ring, X-shaped and Y-shaped.

В настоящее время большое внимание уделяют физике мягких материалов и наноматериалов. Можно говорить о переходе от конструкционных материалов к функциональным и смарт-материалам, меняющим свое поведение в зависимости от параметров окружающей среды. Конечно, в первую очередь это связано с тем, что экспериментальные технологии вышли на высокий уровень, что дает ученым возможность контролировать синтез на уровне отдельных частиц, их внутренней структуры, топологии, и даже формы.

В данной работе представлено исследование процесса самоорганизации макромолекулярных магнитных полимеров (магнитных филаментов). Такие магнитные филаменты широко используются для создания новых магнитоуправляемых материалов [1] и представляют собой аналог полимерных цепей, где полимерные молекулы служат в роли сшивок, а магнитные частицы заменяют мономеры.

С помощью компьютерного моделирования мы изучаем влияние полидисперсности на самоорганизацию отдельного магнитного полимера в виде замкнутого кольца, X-образного и Y-образного магнитного полимера. Такие конфигурации являются основными состояниями систем магнитных частиц, что было ранее показано в работе [2]. Нами было рассмотрено и проанализировано три конфигурации замкнутого кольца: (1) кольцо, состоящее только из крупных частиц; (2) кольцо, половина которого состоит из мелких, а половина из крупных частиц; (3) кольцо, разделенное на четыре равные части, которые чередуются в зависимости от размеров частиц. Также рассмотрен случай, когда магнитный филамент имеет X-образную и Y-образную форму, где частицы с меньшим радиусом расположены на краях и в центре полимера. Проанализировано поведение при комнатной температуре всех трех конфигураций филамента при различных длинах и параметрах диполь-дипольного взаимодействия.

Оказалось, что введение всего лишь двух размеров частиц в систему существенно влияет на равновесные свойства, что говорит о необходимости учета полидисперсности при синтезе и анализе поведения магнитных полимеров.

1. Sánchez et al., Magnetic filament brushes: tuning the properties of a magnetoresponsive supramolecular coating, *Faraday Discuss.* 186, 241 (2016).
2. Kantorovich et al., The influence of shape anisotropy on the microstructure of magnetic dipolar particles, *Soft Matter* 9, 6549 (2013).

АНОМАЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛА ФЛЮОРИТА КАЛЬЦИЯ ВЫЗВАННОЕ ПРИМЕСЬЮ НИКЕЛЯ

Сарычев М.Н.¹, Бондаревская А.С.^{1*}, Шутов И.С.¹, Жевстовских И.В.²,
Гудков В.В.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²) Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: any-bondarevskaya@yandex.ru

ANOMALOUS BEHAVIOR OF ELASTIC PROPERTIES OF CALCIUM FLUORITE CRYSTAL INDUCED BY NICKEL IMPURITY

Sarychev M.N.¹, Bondarevskaya A.S.^{1*}, Shutov I.S.¹, Zhevstovskikh I.V.²,
Gudkov V.V.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) M.N. Miheev Institute of Metal Physics, UB RAS, Yekaterinburg, Russia

We report the results of ultrasound studies in the CaF_2 crystal containing the low concentration impurity of nickel. We observed anomaly peaks of the elastic modulus in the temperature dependence of attenuation of ultrasound at frequency 20-55 MHz for the shear wave propagating along the [100] direction and anomalous softening of the elastic modulus c_{44} in the temperature interval 40-60 K. For the longitudinal mode propagating along the [100] direction the peak of attenuation and the softening of the elastic modulus c_{11} did not appear. We show that these anomalies are due to the ultrasound relaxation by the system of non-interaction Ni^{2+} Jahn-Teller centers with the 3T_1 ground orbital state.

При изовалентном замещении кальция ионами Ni^{2+} в кристалле со структурой флюорита CaF_2 , ион Ni^{2+} оказывается в кубическом окружении, образованными ионами фтора, с основным трехкратно вырожденным орбитальным состоянием 3T_1 . В этом случае энергия кристалла может понижаться за счет локальных искажений решетки, приводящих к снятию вырождения, в чем проявляется эффект Яна-Теллера (ЯТ) [1]. На температурных зависимостях поглощения