

## **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](mailto: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.<sup>1</sup>, Бондаревская А.С.<sup>1\*</sup>, Шутов И.С.<sup>1</sup>, Жевстовских И.В.<sup>2</sup>,  
Гудков В.В.<sup>1</sup>

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

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

\*E-mail: [any-bondarevskaya@yandex.ru](mailto:any-bondarevskaya@yandex.ru)

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

Sarychev M.N.<sup>1</sup>, Bondarevskaya A.S.<sup>1\*</sup>, Shutov I.S.<sup>1</sup>, Zhevstovskikh I.V.<sup>2</sup>,  
Gudkov V.V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2</sup>) 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