



ПРАВИТЕЛЬСТВО
ОМСКОЙ ОБЛАСТИ



Омский
государственный
университет
им. Ф.М. Достоевского

**XLVII региональная студенческая
научно-практическая конференция**

МОЛОДЕЖЬ ТРЕТЬЕГО ТЫСЯЧЕЛЕТΙΑ

СБОРНИК НАУЧНЫХ СТАТЕЙ

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ ОМСКОЙ ОБЛАСТИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

«ОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Ф.М. ДОСТОЕВСКОГО»

МОЛОДЁЖЬ ТРЕТЬЕГО ТЫСЯЧЕЛЕТИЯ

Сборник научных статей

© ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», 2023

ISBN

УДК 378

ББК

М

*Издаётся в авторской редакции в соответствии с макетом,
предоставленным оргкомитетом.*

Организационный комитет:

*С.В. Замятин, С.В. Ефимов, В.В. Бражник, А.Г. Бреусова, Н.И. Быкова,
С.П. Бычков, Ю.В. Захарова, Д.В. Мажеева, М.В. Мамонова,
П.А. Пятанова, А.А. Смагина, М.В. Терских, Т.Ф. Яцук*

М 754

Молодёжь третьего тысячелетия [Электронный ресурс] : сборник научных статей. Т. 1. Ч. 1. – Омск : Издательство Омского государственного университета, 2023. – 1 CD-ROM. – Загл. с титул. экрана.

ISBN

Публикуются статьи участников XLVII региональной студенческой научно-практической конференции «Молодёжь третьего тысячелетия», прошедшей в Омском государственном университете им. Ф.М. Достоевского в период с 1 апреля по 15 мая 2023 г.

УДК 378

ББК

Текстовое электронное издание

Самостоятельное электронное издание

Минимальные системные требования:

процессор с частотой 1,3 ГГц или выше; ОЗУ 512 Мб; Microsoft Windows XP/Vista/7/8/10; Adobe Acrobat Reader 8.0 и выше; CD-ROM; мышь

MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION
OF THE RUSSIAN FEDERATION

MINISTRY OF EDUCATION OF THE OMSK REGION

Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education

“Dostoevsky Omsk State University”

YOUTH OF THE THIRD MILLENIUM

Collection of Scientific Articles

© Dostoevsky Omsk State University, 2023

ISBN

UDC 378

BBC

M

*Published in the authors' edition in accordance with the layout,
provided by the organising committee.*

Organising Committee:

*S.V. Zamyatin, S.V. Efimov, V.V. Brazhnik, A.G. Breusova, N.I. Bykova,
S.P. Bychkov, Yu.V. Zakharova, D.V. Mazhaeva, M.V. Mamonova,
P.A. Pyatanova, A.A. Smagina, M.V. Terskikh, T.F. Yaschuk*

M 754 **Youth of the Third Millenium** [Electronic resource] : a collection of scientific articles. V. 1. P. 1. – Omsk : Omsk State University Publishing House, 2023. – 1 CD-ROM. – The title on the main screen.

ISBN

The articles of the 47th Regional student scientific and practical conference “Youth of the Third Millenium” held in Dostoevsky Omsk State University from 1st April to 15th May 2023 are published.

UDC 378

BBC

Text electronic publication

Independent electronic publication

Minimal system requirements:

processor frequency 1,3 GHz and higher; RAM 512 Mb; Microsoft Windows 2000/XP/Vista/7;

Adobe Acrobat Reader 8.0 and higher; CD-ROM; mouse

СОДЕРЖАНИЕ

<i>ЭКОНОМИКА И УПРАВЛЕНИЕ</i>	11
Бондарева С.А. ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОРГАНИЗАЦИИ ПЕРСОНАЛОМ НА ОСНОВЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С АУТСОРСИНГОВЫМИ КОМПАНИЯМИ: ТЕХНОЛОГИЯ И ЭФФЕКТИВНОСТЬ	11
Герман Д.В. НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ ВНЕШНЕЭКОНОМИЧЕСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ РЕГИОНА (НА ПРИМЕРЕ ОМСКОЙ ОБЛАСТИ)	14
Горпинич А.А. ОСОБЕННОСТИ И СФЕРА ПРИМЕНЕНИЯ ИНСТРУМЕНТОВ КОУЧИНГА В РАЗВИТИИ ПЕРСОНАЛА	18
Ерощенко Ю.Д. ВОЗМОЖНОСТИ И ОГРАНИЧЕНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ КОММУНИКАЦИЙ РУКОВОДИТЕЛЕЙ С РАБОТНИКАМИ ПОКОЛЕНИЯ «Z» (НА ПРИМЕРЕ ОКТЯБРЬСКОЙ ЖЕЛЕЗНОЙ ДОРОГИ).....	23
Киреева А.И. ИНДИВИДУАЛЬНАЯ ТРАЕКТОРИЯ СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ ПРОЦЕССА АДАПТАЦИИ ПЕРСОНАЛА НА ПРИМЕРЕ ПРОИЗВОДСТВЕННОГО ПРЕДПРИЯТИЯ ...	27
Коваленко Д.А. СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К РЕГЛАМЕНТАЦИИ ТРУДА – ЦИФРОВИЗАЦИЯ РЕГЛАМЕНТОВ.....	32
Клементьева В.А. СПОСОБЫ НАБОРА ПЕРСОНАЛА В ОРГАНИЗАЦИИ ДОШКОЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ.....	35
Лейман Д.Д. ФОРМИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ РОТАЦИИ ПЕРСОНАЛА В ОРГАНИЗАЦИИ	39
Николаев Д.Н. РЕКОМЕНДАЦИИ ПО УПРАВЛЕНИЮ ПРОИЗВОДСТВЕННЫМИ КОНФЛИКТАМИ НА ПРИМЕРЕ ПРЕДПРИЯТИЯ МУП «ТАРСКОЕ ПОКХ».....	43
Писаренко Е.В. УПРАВЛЕНИЕ РАЗВИТИЕМ ВНЕШНЕЭКОНОМИЧЕСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СУБЪЕКТОВ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ (НА ПРИМЕРЕ ОМСКОЙ ОБЛАСТИ).....	47
Решетняк В.С. ПРИОРИТЕТНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ УПРАВЛЕНИЯ ПЕРСОНАЛОМ В СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ ОРГАНИЗАЦИЯХ (НА ПРИМЕРЕ КХ «БЕЛИЦКОЕ» и КФХ «ВЕРНОВ» ЧЕРЛАКСКОГО РАЙОНА ОМСКОЙ ОБЛАСТИ).....	51
Холкина Е.В. РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОЦЕНКЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ОБУЧЕНИЯ РАБОЧИХ	55
Черемных П.А. ПОВЫШЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТИВНОСТИ ПОДБОРА РАБОЧИХ ЗА СЧЕТ ПРИМЕНЕНИЯ ЦИФРОВЫХ ИНСТРУМЕНТОВ.....	58
<i>ПЕРЕВОДОВЕДЕНИЕ И МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ИНОСТРАННЫХ ЯЗЫКОВ</i>	63
Клюстер А.В. ПРОБЛЕМА ПЕРЕВОДА АВТОРСКИХ ФРАЗЕОЛОГИЗМОВ В РОССИЙСКИХ АУДИОВИЗУАЛЬНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЯХ ПЕРИОДА 90-Х ГОДОВ НА АНГЛИЙСКИЙ ЯЗЫК (НА МАТЕРИАЛЕ ФИЛЬМА А. БАЛАБАНОВА «БРАТ»)	63
Сычева А.Н. ТИПИЧНЫЕ ОШИБКИ ПРИ ПЕРЕВОДЕ СУБТИТРОВ С АНГЛИЙСКОГО ЯЗЫКА НА РУССКИЙ (НА МАТЕРИАЛЕ СЕРИАЛОВ ПРОИЗВОДСТВА NETFLIX)	67

Линдикрин Д.С. СПОСОБЫ СОЗДАНИЯ КОМИЧЕСКОГО В ПОЛИКОДОВОМ ТЕКСТЕ (НА МАТЕРИАЛЕ СИТКОМОВ)	71
Школа Д.О. ОШИБКИ ПРИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В ВИДЕОИГРАХ С АНГЛИЙСКОГО НА РУССКИЙ ЯЗЫК.....	75
Исакова А.М. ФУНКЦИОНИРОВАНИЕ СЛОВ-ПАРАЗИТОВ И ПРОБЛЕМА ИХ ПЕРЕВОДА (НА МАТЕРИАЛЕ АНГЛОЯЗЫЧНОГО СИТКОМА)	79
Навроцкая А.А., Осипчук О.С. РАЗЛИЧНЫЕ ТАКТИКИ ПРИ РЕАЛИЗАЦИИ СТРАТЕГИИ ДИСКРЕДИТАЦИИ В АМЕРИКАНСКОМ ПОЛИТИЧЕСКОМ ДИСКУРСЕ И НЕОБХОДИМОСТЬ СОХРАНЕНИЯ ПЕЙОРАТИВНОЙ КОННОТАЦИИ В ПЕРЕВОДЕ (НА ПРИМЕРЕ ВЫСКАЗЫВАНИЙ ДЖО БАЙДЕНА)	84
Петрова Н.Н., Шипикова А.И. О ФОНЕТИЧЕСКИХ АСПЕКТАХ ВОЕННОГО ДИСКУРСА	88
Чувайлова Е.М., Матвеева Л.А. МЕТАФОРИЧЕСКИЕ ТЕРМИНЫ В НЕФТЕГАЗОВОЙ ТЕРМИНОСИСТЕМЕ АНГЛИЙСКОГО И РУССКОГО ЯЗЫКОВ	92
Омельченко Д.С., Кононов Д.А. ПЕРЕДАЧА КУЛЬТУРНЫХ И КВАЗИКУЛЬТУРНЫХ РЕАЛИЙ ПРИ ПЕРЕВОДЕ ХУДОЖЕСТВЕННОГО ТЕКСТА ПОВЕСТИ А. И Б. СТРУГАЦКИХ «ПИКНИК НА ОБОЧИНЕ» С РУССКОГО ЯЗЫКА НА АНГЛИЙСКИЙ ЯЗЫК	96
Терещенко А.С. ПЕРЕВОД РЕАЛИЙ В СЕРИАЛАХ В ЖАНРЕ ФЭНТЕЗИ	100
Сачан В.В., Богатова С.М. КОНЦЕПТ СМЕРТЬ В ТВОРЧЕСТВЕ Э. ПО И Н. ГОГОЛЯ: СОПОСТАВИТЕЛЬНЫЙ АСПЕКТ	104
Шипикова А.И. АНГЛОЯЗЫЧНАЯ ТЕРМИНОЛОГИЯ ВОЕННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ПЕРИОДА СВО (СПЕЦИАЛЬНОЙ ВОЕННОЙ ОПЕРАЦИИ НА УКРАИНЕ) И ВОЗМОЖНОСТИ ЕЕ ПЕРЕДАЧИ НА РУССКИЙ ЯЗЫК)	108
Жилин Н.М. ФИЛЬТРЫ НА ОСНОВЕ РЕЗОНАТОРОВ НА ОБЪЕМНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛНАХ.....	112
Иванова О.В. К ВОПРОСУ О РАЗВИТИИ МОЛОДЫХ РУКОВОДИТЕЛЕЙ В БИЗНЕС-ОРГАНИЗАЦИЯХ: ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЙ И ЛИЧНОСТНЫЙ АСПЕКТЫ	116
Малева Э.М. ИСТОКИ СУДЕБНОЙ МЕДИЦИНЫ В РОССИИ: ИСТОРИКО-ПРАВОВОЙ АСПЕКТ.....	119
Гладышева А.А. ЦИФРОВИЗАЦИЯ ГОРОДСКОЙ СРЕДЫ КАК ФАКТОР ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПСИХОЛОГИЧЕСКОГО КОМФОРТА ГРАЖДАН	122
<i>ИСТОРИЯ.....</i>	<i>126</i>
Дъячук Е.Е. ОБРАЗ ИМПЕРАТРИЦЫ У ЦЗЭТЯНЬ В ИСТОРИОГРАФИИ	126
Лебеденко А.В. ЮКИО МИСИМА – «ПОСЛЕДНИЙ САМУРАЙ»?.....	129
Полякова Т.М. ВОССТАНИЕ ИХЭТУАНЕЙ НА СТРАНИЦАХ ГАЗЕТЫ «L'ÉCHO DE MANITOBA».....	133
Юрасов И.С. ГЛАВНЫЙ КОМИТЕТ ПО КРЕСТЬЯНСКОМУ ДЕЛУ И РЕДАКЦИОННЫЕ КОМИССИИ КАК СУБЪЕКТЫ КРЕСТЬЯНСКОЙ РЕФОРМЫ: ОПЫТ СРАВНИТЕЛЬНОГО АНАЛИЗА.....	136
Алексеева А.С. СПОРТИВНАЯ ДИПЛОМАТИЯ КАК ФАКТОР ПОЛИТИКИ В СОВРЕМЕННОЙ РОССИИ.....	139

Дальберг К.Д. РАЗНОГЛАСИЯ ВНУТРИ ПАРТИЙНОЙ СИСТЕМЫ ВЕЛИКОБРИТАНИИ ОБ ОТКАЗЕ ОТ ПОЛИТИКИ «БЛЕСТЯЩЕЙ ИЗОЛЯЦИИ».....	144
Лысенко Н.С. НАРКОТРАФИК КАК ФАКТОР РЕГИОНАЛЬНОЙ ПОЛИТИКИ В ЛАТИНСКОЙ АМЕРИКЕ: ОПЫТ ИВЕНТ-АНАЛИЗА.....	148
Вершинин Д.А. ЭВОЛЮЦИЯ ДЕТСКОГО ВОСПИТАНИЯ В РОССИИ И ВЗГЛЯД ИСТОРИКА В.О. КЛЮЧЕВСКОГО НА ЕГО ОСНОВНЫЕ ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ.....	153
Сухостав О.В. М.П. ПОГОДИН И ЕГО РАССУЖДЕНИЯ О ПОЛЬШЕ В РАМКАХ ПУБЛИЦИСТИЧЕСКИХ СТАТЕЙ 1830-1860-Х ГГ.....	156
Шевченко К.А. ПОЧЕМУ НЕ СОСТОЯЛАСЬ РОССИЙСКАЯ ДЕМОКРАТИЯ?.....	160
Головачева П.В. ПРАВОВОЕ УРЕГУЛИРОВАНИЕ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ УЛИЧНЫХ ГОНЩИКОВ НА ПРИМЕРЕ ГОРОДА ОМСКА.....	164
Гутник Е.Ю. УГОРСКАЯ ЭТНОГРАФИЯ 1960-1980 ГГ. В ЭКСПЕДИЦИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ В.М. КУЛЕМЗИНА.....	167
Закандаев В.И. ОБРАЗ АРХЕОЛОГА В ВИДЕОИГРАХ.....	170
Зимица О.Г. ОТНОШЕНИЕ К ЧИСТОТЕ ЖИЛОГО ПРОСТРАНСТВА В ТРАДИЦИОННОЙ КУЛЬТУРЕ РУССКИХ.....	174
Кириков Н.А. МЯСО И МЯСНЫЕ ПРОДУКТЫ В ПИЩЕВОМ КОМПЛЕКСЕ КАЗАХОВ ОМСКОГО ПРИИРТЫШЬЯ В XXI ВЕКЕ.....	178
Климов Г.А. ХАРАКТЕРИСТИКА СЛЕДОВ ПЕРФОРИРОВАНИЯ НА КОСТИ: РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА.....	182
Корнилов А.Д. ТАТУ КУЛЬТУРА В СИБИРСКОМ МЕГАПОЛИСЕ: АНТРОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД (НА ПРИМЕРЕ ГОРОДА ОМСКА).....	186
Кривошеева А.А. ВРЕДНОСНАЯ МАГИЯ В СИБИРСКОМ СЕЛЕ (ПО МАТЕРИАЛАМ ЭТНОГРАФИЧЕСКИХ ПРАКТИК ОМГУ 2019–2022 ГОДОВ).....	189
Развозжаева А.О. ФОЛЬКЛОРНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ И ВОЗМОЖНОСТЬ ИЗУЧЕНИЯ СОВРЕМЕННОЙ СОЦИОКУЛЬТУРНОЙ СИТУАЦИИ В РАМКАХ ФОЛЬКЛОРИСТИЧЕСКОГО ПОДХОДА К ИЗУЧЕНИЮ ПОГРЕБАЛЬНОГО ОБРЯДА РУССКИХ.....	192
Сагнаева Л.Е. ТРАДИЦИЯ ЦЕРЕМОНИАЛЬНОГО ДАРООБМЕНА «КОРЖЫН» У КАЗАХОВ ОМСКОГО ПРИИРТЫШЬЯ.....	195
Саркисян Л.А. РОССИЙСКИЕ ФЕСТИВАЛИ АНТРОПОЛОГИЧЕСКОГО КИНО.....	198
Чинянин П.Ю. БАПТИСТСКАЯ ОБЩИНА КАК РЕЛИГИОЗНАЯ СУБКУЛЬТУРА.....	202
Билькевич В.В. ВЛИЯНИЕ СОЦИОКУЛЬТУРНОЙ СРЕДЫ НА ВОЗНИКНОВЕНИЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ РИСКОВ.....	206
Измайлова А.Н., Кудринская Л.А. ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКОГО ОПЫТА КАК ПЕРЕСЕЧЕНИЕ ИТ И СОЦИОЛОГИИ.....	210
Коржук П.С. СОЦИАЛЬНАЯ ОПАСНОСТЬ НЕЗАВЕРШЁННОЙ СЕПАРАЦИИ ЛИЧНОСТИ.....	213
Лазутина А.Е. СОЦИАЛЬНАЯ СТИГМАТИЗАЦИЯ ПСИХИЧЕСКОГО РАССТРОЙСТВА.....	217

Штенберг К.А. ПРОБЛЕМА САМООПРЕДЕЛЕНИЯ ФЕМИНИЗМА В УСЛОВИЯХ МУЛЬТИГЕНДЕРНОЙ ПОЛИТИКИ	220
Щеколодкина В.Н. БОРЬБА ЗА ГЕГЕМОНИЮ ТРАДИЦИОНАЛИСТСКИХ ГРУПП В РОССИИ	224
<i>ФИЛОСОФИЯ, ТЕОЛОГИЯ, ЭТИКА, КУЛЬТУРОЛОГИЯ</i>	228
Ильина А.Ю. ПРОБЛЕМА ДРУГОГО: ВГЛЯД СИМОНЫ ДЕ БОВУАР	228
Козырев И.А. ВЗАИМООТНОШЕНИЯ “Я” И “ДРУГОГО” В СОВРЕМЕННОМ ИНТЕРНЕТ-ПРОСТРАНСТВЕ	232
Левченко В.В. КАТЕГОРИАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ СИСТЕМ	236
Мынзат Я.А. ФИЛОСОФСКИЕ ОСНОВЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАНОНИЧЕСКОГО И СВЕТСКОГО ПРАВА	240
Першин А.Д. К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ПОНЯТИЯ «АБСУРД»	243
Тумма Е.В. КОНФЛИКТ КАК ФАКТОР ПРОИЗВОДСТВА ИДЕНТИЧНОСТИ: СОЦИАЛЬНО-ФИЛОСОФСКИЙ АНАЛИЗ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ГЕОРГА ЗИММЕЛЯ	246
Агеенко Е. ТРАНСФОРМАЦИЯ ТЕЛЕСНОСТИ В ЭПОХУ ПОСТЧЕЛОВЕКА: РЕЛИГИОЗНЫЙ АСПЕКТ	249
Ванслонович Д.М. ПРОБЛЕМАТИКА ТРАНСГУМАНИЗМА В ДЕТЕРМИНИРОВАННОМ ДИСКУРСЕ РУССКИХ КОСМИСТОВ (ОТЛИЧИЯ ПОНИМАНИЯ СВОБОДЫ)	252
Васильев М.П. ПРОБЛЕМЫ СЕМЬИ. АСКЕТОЛОГИЧЕСКИЙ АСПЕКТ	256
Жорж А.И. ПРАВОСЛАВНЫЙ ТУРИЗМ (ПАЛОМНИЧЕСТВО)	258
Заплатина Е.В. СИБИРСКАЯ ИКОНА В ПРОЦЕССАХ РЕЛИГИОЗНОЙ И КУЛЬТУРНОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ	261
Застровных А.Ю. ПРОФИЛАКТИКА ДЕСТРУКТИВНОГО ПОВЕДЕНИЯ МОЛОДЁЖИ С ПОМОЩЬЮ ТРАДИЦИОННЫХ ЦЕННОСТЕЙ	264
Кайзер Н.А. КУЛЬТ СВЯТОЙ СМЕРТИ	268
Колесникова А.А. МИФОЛОГИЧЕСКИЕ МОТИВЫ В РОМАНЕ ДЖОРДЖА Р.Р. МАРТИНА «ИГРА ПРЕСТОЛОВ»	272
Кремер О.Е. ДЕКАБРИСТЫ И РЕЛИГИЯ	275
Липинский Н.Н. ЭТИЧЕСКОЕ УЧЕНИЕ ЗОРОАСТРИЗМА И ЕГО ВЛИЯНИЕ НА ДАЛЬНЕЙШЕЕ РЕЛИГИОЗНОЕ УЧЕНИЕ	278
Вяткина Д.С. ФЕНОМЕН ПОТОКА В ИСТОРИКО-ФИЛОСОФСКОМ КОНТЕКСТЕ	281
Гофман А.Я. ПОСТАПОКАЛИПСИЧЕСКИЕ СЦЕНАРИИ В 21 ВЕКЕ И ИХ ОТРАЖЕНИЕ В МАССОВОЙ КУЛЬТУРЕ	285
Деревянченко С.Ю. ФЕНОМЕН МОРАЛЬНОЙ ПАНИКИ В РОССИИ	289
Исаев А.В. АГОНАЛЬНЫЙ КОНФЛИКТ В СОВРЕМЕННЫХ КОМПЬЮТЕРНЫХ ИГРАХ	293
Костенко А.В. ВЛИЯНИЕ НОВЫХ МЕДИА НА ПРИНЦИПЫ ПРОДВИЖЕНИЯ КУЛЬТУРНЫХ ПРОЕКТОВ	296

Лучинина К.А. ОСНОВНЫЕ ТЕНДЕНЦИИ СОЦИАЛЬНОЙ РЕКЛАМЫ В СОВРЕМЕННОЙ РОССИИ	300
Мацкевич Я.Г. ЭТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НЕЙРОФАРМАКОЛОГИИ В ГЕНЕРАЦИИ КОГНИТИВНЫХ ФУНКЦИЙ ЧЕЛОВЕКА.....	304
Миленина Д.Д. СОВРЕМЕННЫЕ ЭТИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ, СВЯЗАННЫЕ С ФЕНОМЕНОМ ДЕТСТВА И ОБРАЗОМ РЕБЕНКА	309
Милянкая Е.Р. ЭТИКА ИНДУСТРИИ ШОУ-БИЗНЕСА НА ПРИМЕРЕ К-РОР	313
Московская А.В. ЦЕННОСТНАЯ ПАРАДИГМА КОРПОРАТИВНОЙ КУЛЬТУРЫ	318
Пащина В.В. ЭТИЧЕСКАЯ ПАРАДИГМА ЖЕНЩИНЫ-УПРАВЛЕНЦА.....	323
Пузейко Е.А. БАРБИ В ЗЕРКАЛЕ КУЛЬТУРЫ: СОЦИАЛЬНАЯ НАГРУЗКА И ТРАНСФОРМАЦИЯ СОВРЕМЕННОЙ КУКЛЫ.....	328
Сусленникова К.Д. НЕОАРХАИКА: ВЗГЛЯД ХУДОЖНИКА И АРХЕОЛОГА.....	333
Чернышева Е.Е. ЭТИКА ПЕРЕВОДЧЕСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ В БИЗНЕСЕ	336
КОНЦЕПТ ЭСТЕТИЗАЦИИ НАСИЛИЯ НА ПРИМЕРЕ ФИЛЬМОВ К.ТАРАНТИНО	341
РЕАЛИЗАЦИИ ФЕНОМЕНА РЕСАЙКЛИНГ В КОНЦЕПТУАЛЬНОМ КОНТЕКСТЕ.....	344
<i>ЗДОРОВЬЕСБЕРЕГАЮЩИЕ ТЕХНОЛОГИИ, РЕАБИЛИТАЦИЯ И СПОРТ.....</i>	<i>348</i>
Шалашова М.А. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЗАБОЛЕВАЕМОСТИ СТУДЕНТОВ РАЗНЫХ МЕДИЦИНСКИХ ГРУПП	348
Гриценко М.А. ОСОБЕННОСТИ ПРАКТИКИ ОСОЗНАННОЙ МЕДИТАЦИИ (МАЙНДФУЛНЕСС).....	355
Еремеева А.Д. НАРКОМАНИЯ КАК СОЦИАЛЬНО-НЕГАТИВНОЕ ЯВЛЕНИЕ В МОЛОДЕЖНОЙ СРЕДЕ	359
Исаева А.И. ИННОВАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ АРТ ТЕРАПИИ В ПСИХОЛОГО-ПЕДАГОГИЧЕСКОЙ РЕАБИЛИТАЦИИ.....	363
Полукаров А.Д., Гречко А.С. ПРОФИЛАКТИКА ИСКРИВЛЕНИЙ ПОЗВОНОЧНИКА... 368	
Сергеева В.А. ПАТРИОТИЧЕСКОЕ ВОСПИТАНИЕ НА УРОКАХ ОБЖ В ШКОЛЕ	373
<i>ФИЗИКА.....</i>	<i>377</i>
Голота А.Е., Прудников П.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ.....	377
Друзьев Д.А., Прудников В.В. ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МЕДЛЕННОЙ ДИНАМИКИ В ТРЕХПЛЕНОЧНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ С РАЗЛИЧНЫМИ ТОЛЩИНАМИ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОК	380
Кемпф Л.А., Мамонова М.В. РАСЧЕТ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ СОЕДИНЕНИЯ $Fe_{0.33}TiS_2$	384
Ковалева А.Ю., Прудников В.В. ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ НА НЕРАВНОВЕСНОЕ КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СТРУКТУРНО НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ТРЕХМЕРНОЙ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА	388
Леженина А.Д., Мамонова М.В. РАСЧЕТ ГЕОМЕТРИИ И ЭНЕРГИИ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ СОЕДИНЕНИЙ РЕАКЦИИ ГИДРИРОВАНИЯ ФУРФУРОЛА.....	392

Чубарова А.А., Прудников П.В., Мамонова М.В. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ
МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ
НАНОМАТЕРИАЛОВ..... 396

ФИЗИКА

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

А.Е. Голота, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

MODELING OF CRITICAL PROPERTIES OF NEW MATERIALS BY MACHINE LEARNING METHODS

A.E. Golota, P.V. Prudnikov

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Аннотация. Представлены результаты расчетов критической температуры анизотропной модели Гейзенберга, с типом анизотропии “лёгкая ось”, при помощи предсказаний нейронной сети для задач классификации, основанной на определении состояния системы по её корреляционному поведению. Модель свёрточной нейронной сети была сформирована на основе готовых решений комплексной платформы машинного обучения “Tensorflow”.

Abstract. The results of calculations of the critical temperature of the anisotropic Heisenberg model, with the “light axis” type of anisotropy, using neural network predictions for classification problems, based on determining the state of the system by its correlation behavior are presented. The convolutional neural network model was formed on the basis of ready-made solutions of the “Tensorflow” integrated machine learning platform.

Ключевые слова: Машинное обучение, нейронные сети, моделирование системы, модель Гейзенберга, анизотропия, Tensorflow.

Keywords: Machine learning, neural networks, system modeling, Heisenberg model, anisotropy, Tensorflow.

Благодаря возможности анализировать большие массивы информации и находить в них закономерности, которые не могут быть определены традиционными методами, нейронные сети являются необходимым инструментом для решения значительного количества практических задач. Нейронные сети активно используется как для изучения рентгеновских снимков в медицине, так и для изучения систем в области критических температур в физике [1].

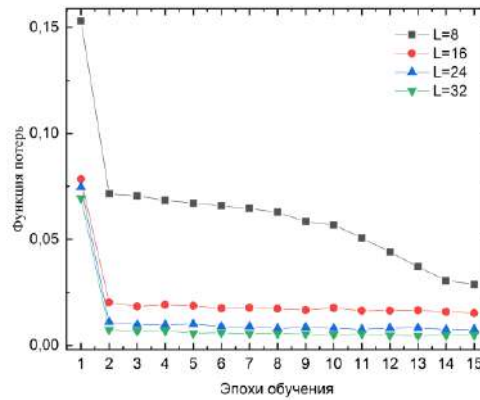


Рис. 1. Зависимость функции ошибки нейронной сети, от количества пройденных эпох обучения.

Целью данной работы является расчет точки фазового перехода трёхмерной модели Гейзенберга с типом анизотропии “легкая ось”, при помощи предсказаний модели нейронной сети. При моделировании системы тренировочные и проверочные данные делились на два типа, до фазового перехода, и после фазового перехода. Как температура разделения была использована температура фазового перехода равная $1.645 J_1$. Рассмотренная модель нейронной сети обучалась с учителем на наборе данных, сформированных методом Монте-Карло и состояла из 3D свёрточных и обобщающих слоёв. На Рис. 1 продемонстрировано увеличение точности предсказаний нейронной сети при увеличении числа эпох и линейных размеров исследуемой системы.

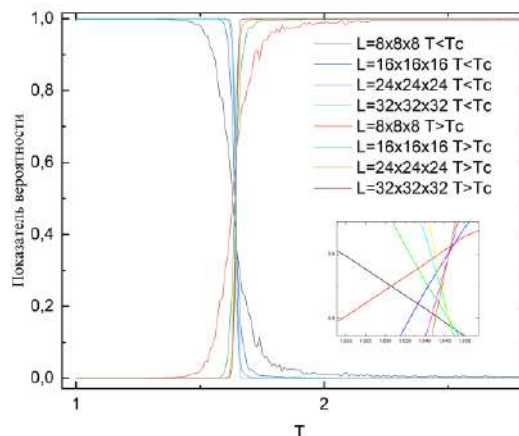


Рис. 2. Результат предсказания нейронной сетью точки фазового перехода анизотропной модели Гейзенберга с типом анизотропии “легкая ось”.

На Рис. 2 представлена вероятность обнаружить состояние системы при данной температуре в в низкотемпературной ($T < T_c$), или высокотемпературной фазе ($T > T_c$). С увеличением линейного размера системы наблюдается смещение предсказанной нейронной сетью точки фазового перехода. Результаты представленные в работе демонстрируют применимость свёрточных нейронных сетей к предсказанию фазового

перехода трёхмерных гейзенберговских моделей со сложным внутрисистемным взаимодействием.

Список литературы:

1. K. Shiina, H. Mori, Yu. Okabe, H.,K. Lee, Sci. Reports 10, 2177 (2020)

Сведения об авторах:

Прудников Павел Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической ФГАОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М.Достоевского», e-mail: prudnikovpv@omsu.ru

Голота Александр Евгеньевич – магистрант 1 курса физического факультета ФГАОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МЕДЛЕННОЙ ДИНАМИКИ В ТРЕХПЛЕНОЧНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ С РАЗЛИЧНЫМИ ТОЛЩИНАМИ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОК

Д.А. Друзьев, В.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

INVESTIGATION OF THE FEATURES OF SLOW DYNAMICS IN TRILAYER NANOSTRUCTURES WITH DIFFERENT THICKNESSES OF FERROMAGNETIC FILMS

D.A Druzev, V.V. Prudnikov

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Аннотация. Представлены результаты исследования поведения трехпленочных наноструктур численными методами Монте-Карло, описываемых моделью Гейзенберга с анизотропией типа лёгкая плоскость. Исследовано влияние толщины пленок и температуры замораживания на неравновесное поведение модели. При исследовании двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости выявлены эффекты старения.

Abstract. The results of study by numerical Monte Carlo methods of trilayer nanostructures behavior, described by the Heisenberg model with easy-plane anisotropy, are presented. The effect of film thickness and quenching temperature on the nonequilibrium behavior of the model is studied. Aging effects at two-time dependence of the autocorrelation function and dynamic susceptibility are revealed.

Ключевые слова: Метод Монте-Карло, неравновесное критическое поведение, анизотропная модель Гейзенберга, ультратонкие магнитные пленки, эффекты старения.

Keywords: Monte Carlo method, non-equilibrium behavior, anisotropic Heisenberg model, ultra-thin magnetic films, aging effects.

В последние годы физика ультратонких магнитных пленок и мультислойных наноструктур на их основе характеризуется интенсивными исследованиями [1]. Целый ряд уникальных свойств этих пленок, существенно отличающихся от свойств объемных материалов, вызывает к ним повышенный интерес. Использование ферромагнитных пленок на основе переходных металлов Fe, Co и Ni в искусственно созданных многослойных сверхструктурах приводит к таким практически важным явлениям, как эффект гигантского магнитосопротивления [2]. Природа магнитного порядка в ультратонких ферромагнитных пленках очень сложна из-за конкуренции между обменными и дипольными взаимодействиями на разных масштабах длины, а также сильного влияния формы и магнитокристаллической анизотропии образцов. Целью данной работы является моделирование неравновесного поведения трехпленочной магнитной наноструктуры с различными толщинами ферромагнитных пленок $N=3, 21$ нанослоев и анизотропией легкая плоскость.

Для корректного описания физических свойства тонких ферромагнитных пленок и их взаимодействия в наноструктуре важным является правильный выбор модели, так как магнитные свойства ультратонких пленок чувствительны к эффектам анизотропии, создаваемой кристаллическим полем подложки или немагнитных прослоек. Магнитные свойства ультратонких пленок из переходных металлов, контактирующих с пленками немагнитных благородных металлов, корректно описываются анизотропной моделью Гейзенберга [3-6], задаваемой гамильтонианом:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + (1 - \Delta(N)) S_i^z S_j^z], \quad (1)$$

где S_i^x, S_i^y, S_i^z — компоненты i -го спина ГЦК решетки системы Co/Cu; $\Delta(N)$ — параметр анизотропии, зависящий от толщины ферромагнитной пленки, в данной работе $\Delta(N=3)=0.665$, $\Delta(N=21)=0.02$; J_{ij} — интеграл обменного взаимодействия между спинами в ячейках i и j . Сама спиновая структура задается линейными размерами L и толщиной N с периодическими граничными условиями в плоскости пленки. Для удобства описания поведения модели, принято измерять температуру моделирования в единицах обменного интеграла, поэтому интеграл взаимодействия между спинами внутри пленки берется за единицу $J_1=1$, а для взаимодействия между пленками $J_2 = -0.1J_1$. Отрицательность J_2 отражает факт, что в структурах с эффектом гигантского магнитосопротивления толщина немагнитной прослойки подбирается так, чтобы дальнедействующее и осциллирующее межслоевое обменное взаимодействие между спинами ферромагнитных слоев носило эффективный антиферромагнитный характер [7]. За счет этого взаимодействия намагниченности соседних ферромагнитных слоев ориентируются противоположно друг другу.

Системы с медленной динамикой, к которым относятся и мультислойные магнитные наноструктуры [7], характеризуются проявлением эффектов старения в двухвременной зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ от времени ожидания t_w и времени наблюдения $t-t_w$. Следовательно, можно утверждать, что данные функции являются важными характеристиками при исследовании неравновесной критической динамики системы. Автокорреляционная функция $C(t, t_w)$ задается выражением:

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \vec{S}_i(t) \vec{S}_i(t_w) \right\rangle - \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \vec{S}_i(t) \right\rangle \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \vec{S}_i(t_w) \right\rangle, \quad (2)$$

где N_s — кол-во спинов в структуре, угловые скобки означают усреднение по независимым статистическим конфигурациям. При моделировании использовался алгоритм Метрополиса.

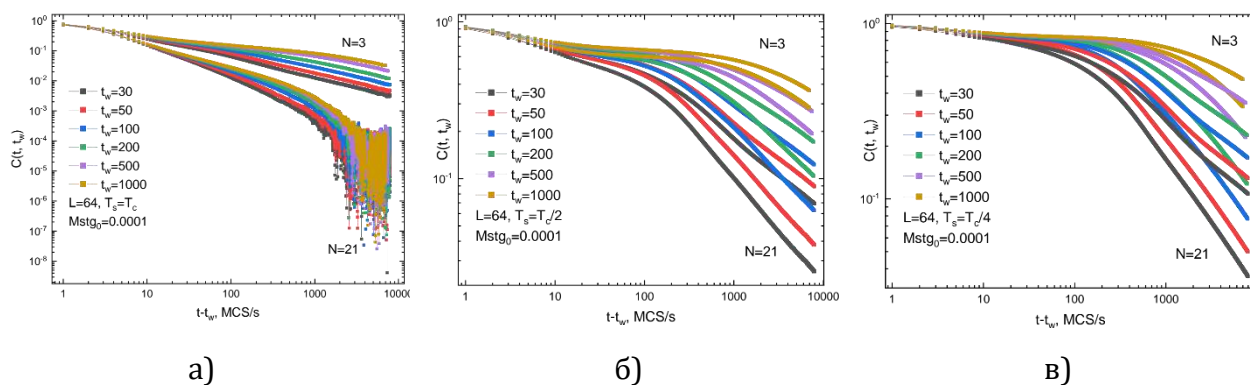


Рис. 1. Поведение двухвременной автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ при эволюции из высокотемпературного начального состояния с начальной намагниченностью $M(0) \ll 1$ для толщин пленок $N=3, 21$ для различных температур моделирования $T=T_c$ (а), $T=T_c/2$ (б), $T=T_c/4$ (в).

Анализ зависимостей, представленных на рис. 1, показывает, что автокорреляционная функция при эволюции из высокотемпературного начального состояния с начальной намагниченностью $M(0) \ll 1$ имеет более сильную размерную зависимость от N при критической температуре $T_c(N=3)=2.391(6)$, $T_c(N=21)=3.21(3)$, чем в низкотемпературной фазе.

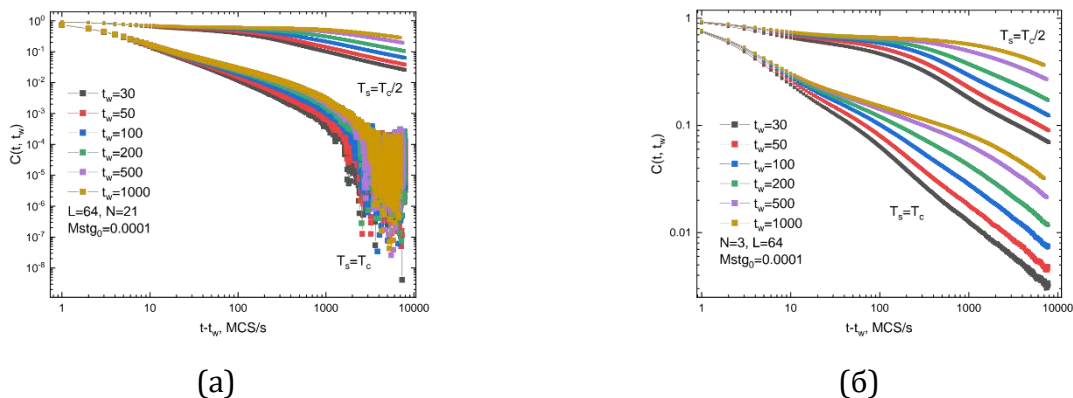


Рис. 2. Поведение двухвременной автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ при эволюции из высокотемпературного начального состояния с начальной намагниченностью $M(0) \ll 1$ для температур моделирования $T=T_c$, $T_c/2$ для различных толщин пленки $N=21$ (а), $N=3$ (б).

На рис. 2 наглядно показано, что с увеличением толщины пленки N автокорреляционная функция в критической точке спадает быстрее, чем при более низких температурах. Во временных зависимостях автокорреляционной функции были выявлены эффекты старения, возникающие не только при критической температуре, но и во всей низкотемпературной фазе. Проанализировано влияние температуры на характер временной эволюции данных характеристик в зависимости от толщины ферромагнитных пленок N .

Список литературы:

1. Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G. Magnetism in ultrathin film structures // Rep. Prog. Phys. 2008. V. 71. P. 056501-056578.
2. Ферт А. Происхождение, развитие и перспективы спинтроники // УФН. 2008. Т. 178. С. 1336-1348.
3. Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А. Размерные эффекты в ультратонких магнитных пленках // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. С. 501-505.
4. Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Menshikova M.A., Piskunova N.I. Dimensionality crossover in critical behaviour of ultrathin ferromagnetic films // J. Magn. Magn. Mater. 2015. Vol. 387. P. 77-82.
5. Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Эффекты старения в неравновесном поведении магнитных сверхструктур и их проявление в магнитосопротивлении // ЖЭТФ. 2018. Т. 154. С. 855-867.
6. Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В., Самошилова А.А. Влияние неравновесного поведения трехплечных структур на их магнитосопротивление // Вестник Омского университета. 2018. № 3. С. 82-88.
7. Mukherjee T., Pleimling M., Binek Ch. Probing equilibrium by nonequilibrium dynamics: aging in Co/Cr superlattices // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. 134425.

Сведения об авторах:

Прудников Владимир Васильевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики ФГАОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М.Достоевского», e-mail: prudnikov@mail.ru

Друзьев Дмитрий Андреевич – бакалавр 4 курса физического факультета ФГАОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского», e-mail: druzev1@mail.ru

**РАСЧЕТ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ
СОЕДИНЕНИЯ $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$**

Л.А. Кемпф, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

**CALCULATION OF THE CRYSTAL STRUCTURE AND DENSITY OF STATES OF THE
COMPOUND $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$**

L.A. Kempf, M.V. Mamonova

Dostoevsky Omsk State University? Omsk, Russia

Аннотация. С помощью программного комплекса VASP был проведен расчет кристаллической структуры соединения $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$ для двух вариантов: изменения положений атомов с сохранением или изменением формы и размера ячейки. На основании полученных данных найдены значения полной энергии и магнитных моментов атомов в суперъячейке.

Abstract. The crystal structure of the $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$ compound was calculated for two variants: changes in the positions of atoms with preservation or change in the shape and size of the cell. Based on the data obtained, the values of the total energy and magnetic moments of the atoms in the supercell are found.

Ключевые слова: Программный комплекс VASP, дихалькогениды, интеркалированные соединения, константы гексагональной решетки, магнитный момент.

Keywords: VASP software package, dichalcogenides, intercalated compounds, hexagonal lattice constants, magnetic moment.

Слоистые дихалькогениды переходных металлов TX_2 , где Т – переходный металл, Х – халькоген, представляют собой отдельный класс материалов, обладающих гексагональной слоистой структурой с достаточно сильной внутрислойной ковалентной связью и слабой межслойной ван-дер-ваальсовой связью [1], вызывая интерес из-за разнообразия необычных свойств и практических применений [2,3].

Различные «гостевые» атомы (щелочных или переходных металлов) проникают в ван-дер-ваальсовы промежутки между основными слоями, образуя новые системы материалов, называемые интеркаляционными соединениями, которые проявляют множество интересных физических свойств, отличных от свойств исходных кристаллов [4]. Интеркалирование атомов или молекул стало мощным подходом к изменению свойств материала, приводящим к фазовому переходу или образованию субстехиометрических фаз путем настройки состава, тем самым расширяя электронный и оптический спектр этих материалов для широкого спектра применений [5].

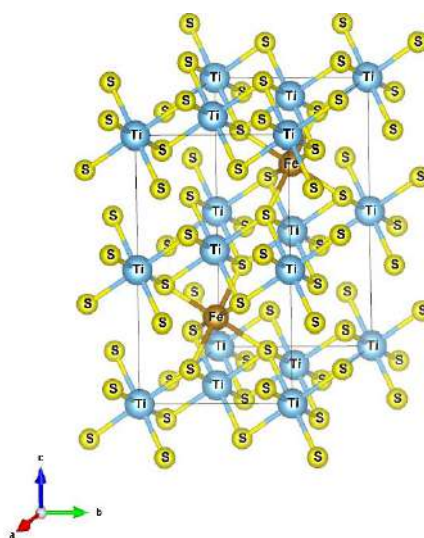


Рис. 1. Кристаллическая структура $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$.

Целью данной работы является расчет кристаллической структуры, вид которой приведен на рисунке 1 и плотности состояний интеркаляционного соединения $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$.

Сначала исследовалась немагнитная структура для проведения оптимизации кристаллической решетки в зависимости от параметров сходимости. На рис. 2 представлена зависимость отношения параметров гексагональной решетки c/a и полной энергии E_0 от количества k -точек K_p , которые задают число разбиений k -сетки при интегрировании по первой зоне Бриллюэна.

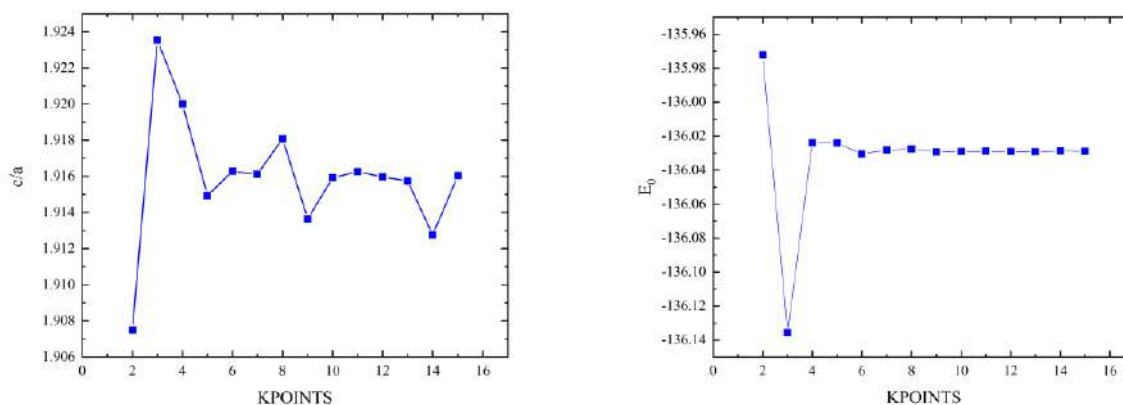


Рис. 2. Зависимость c/a и полной энергии E_0 от количества точек K_p для немагнитного состояния.

Из рис. 2 видно, что в немагнитном состоянии сходимость полной энергии E_0 от количества k -точек K_p достигается при $K_p = 8$ с точностью $\sim 10^{-4}$ эВ, при этом сходимость параметров решетки достигается при $K_p = 12$ с точностью $\sim 10^{-3}$.

В таб. 1 представлены значения констант гексагональной решетки при $K_p = 8$ для двух вариантов расчетов: без оптимизации, т.е. при изменении положения атомов с сохранением формы и размера ячейки, и с оптимизацией, т.е. с изменением формы и размера ячейки.

Таблица 1. Константы гексагональной решетки для немагнитного $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$.

	a, Å	c, Å	V, Å ³
Без оптимизации	5,90620	11,39820	344,3366
С оптимизацией	5,82042	11,16397	327,5362
Motizuki et al[6]	5,929	17,124	601,96067

Затем проводилось исследование $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$ с учетом коллинеарного магнетизма с направлением намагниченности для всех атомов вдоль оси Oz. Рассчитанные значения магнитного момента каждого атома и суммарного магнитного момента $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$ приведены в таб. 2.

Таблица 2. Магнитный момент и суммарный магнитный момент по формуле ферромагнитного $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$ в сравнении с результатами других авторов [6] и экспериментальными данными [7].

	Результат	[6]	[7]
Fe	2.587	2.36	2.1
Ti	-0.153	-0.09	
S	0.032	0.03	
Total	2.346	2.39	

Как видно из таб. 2, одной из характерных особенностей ферромагнитного состояния $\text{Fe}_{0.33}\text{TiS}_2$ является то, что направление момента иона Ti противоположно направлению момента иона Fe.

Список литературы:

1. Han G.H., Duong D.L., Keum D.H., Yun S.J., Lee Y.H. van der Waals Metallic Transition Metal Dichalcogenides. // Chemical Reviews. 2018. V. 118. P. 6297-6336.
2. Manzeli S., Ovchinnikov D., Pasquier D., Yazyev O.V., Kis A. 2D transition metal dichalcogenides. // Nature Reviews Materials. 2017. V. 2. P. 1-15.
3. Shi J., Hong M., Zhang Z., Ji Q., Zhang Y. Physical properties and potential applications of two-dimensional metallic transition metal dichalcogenides. // Coordination Chemistry Reviews. 2018. V. 376. P. 1-19.

4. Inoue M., Hughes H.P., Yoffe A.D. The electronic and magnetic properties of the 3d transition metal intercalates of TiS_x . // *Advances in Physics*. 1989. V. 38. No. 5. P. 565-604.

5. Wang Z., Li R., Su C., Loh K.P. Intercalated phases of transition metal dichalcogenides. // *SmartMat*. 2020. P. 1-27.

6. Motizuki K., Suzuki N. Intercalation Compounds of Transition-Metal Dichalcogenides / ed. F. E. Fujita, Springer Series in Material Sciences, Berlin: Springer, 1994. V. 27. P. 107-140

7. Inoue M., Matsumoto M., Negishi H., Sakai H. Low field ac magnetic susceptibility measurements of intercalation compounds M_xTiS_2 ($M = 3d$ transition metals). // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 1985. V. 53. P. 131-138.

Сведения об авторах:

Мамонова Марина Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М.Достоевского», e-mail: MamonovaMV@omsu.ru

Кемпф Людмила Андреевна – бакалавр 4 курса физического факультета ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», e-mail: lyuda.kempff@mail.ru

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ НА НЕРАВНОВЕСНОЕ КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СТРУКТУРНО НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ТРЕХМЕРНОЙ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

А.Ю. Ковалева, В.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

INFLUENCE OF ANISOTROPY ON THE NONEQUILIBRIUM CRITICAL BEHAVIOR OF DILUTED THREE-DIMENSIONAL ANISOTROPIC HEISENBERG MODEL

A.Y. Kovaleva, V.V. Prudnikov

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Аннотация. Представлены результаты исследования численными методами Монте-Карло влияния анизотропии на неравновесное критическое поведение трехмерной анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось». Исследовано поведение намагниченности. При исследовании двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости выявлены эффекты старения. Определено предельное значение флуктуационно-диссипативного отношения (ФДО).

Abstract. The results of numerical Monte-Carlo study of the effect of anisotropy on the nonequilibrium critical behavior of the three-dimensional anisotropic Heisenberg model with easy axis anisotropy are presented. The behavior of the magnetization has been studied. Ageing effects in two-time dependence of the autocorrelation function and the dynamic susceptibility are observed. Asymptotic fluctuation-dissipation ratios are determined.

Ключевые слова: Метод Монте-Карло, неравновесное критическое поведение, трехмерная анизотропная модель Гейзенберга, влияние анизотропии, эффекты старения.

Keywords: Monte Carlo method, non-equilibrium behavior, three-dimensional anisotropic Heisenberg model, influence of anisotropy, ageing effects.

Трехмерная классическая ферромагнитная модель Гейзенберга — одна из традиционных статистических моделей, используемых для описания фазовых переходов в различных спиновых системах. Статическое критическое поведение систем, описываемое данной моделью, исследовалось различными методами [1], однако меньшее число работ посвящено исследованию критической динамики. Исследование неравновесного критического поведения трехмерной анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось» и спиновой концентрацией $p = 0.9$ было осуществлено ранее при значении параметра анизотропии $\Delta = 0.63$ [2]. Целью данной работы является исследование влияния анизотропии на неравновесное критическое поведение трехмерной анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа легкая ось и спиновой концентрацией $p = 0.9$.

Гамильтониан неупорядоченной ферромагнитной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось» и замороженными дефектами имеет вид:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] \quad (1)$$

где $J > 0$ – константа обменного взаимодействия, S_i^x, S_i^y, S_i^z – компоненты трехмерного вектора спина \vec{S}_i в i -м узле решетки, $\langle i,j \rangle$ указывает на суммирование по ближайшим соседям, p_i – переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе, Δ – безразмерный параметр анизотропии. В данной работе параметр анизотропии принимает значения $\Delta = 0.1, \Delta = 0.3, \Delta = 0.63$. В анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось» медленной критической динамикой характеризуется только составляющая намагниченности $M_z(t)$ [3]. На рис. 1 представлена временная зависимость намагниченности систем с различными значениями параметра анизотропии Δ .

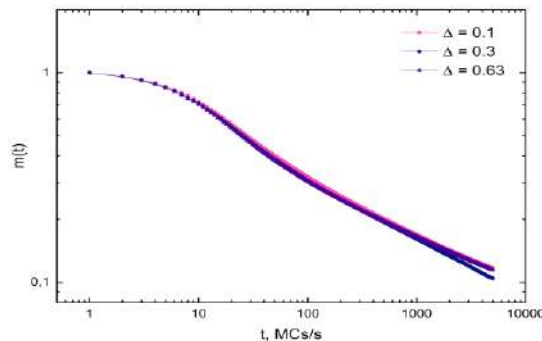


Рис. 1. Динамическая зависимость намагниченности $m(t)$ для систем с $\Delta = 0.1, \Delta = 0.3, \Delta = 0.63$.

В таблице 1 приведены полученные для систем с $\Delta = 0.1, \Delta = 0.3, \Delta = 0.63$ значения критического показателя $\beta/\nu z$.

Таблица 1. Влияние анизотропии на значение критического показателя $\beta/\nu z$

	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.3$	$\Delta = 0.63$
$\beta/\nu z$	0.2353(20)	0.2388(51)	0.23354(23)
			[2]

Правильными корреляционными свойствами неравновесного критического поведения характеризуется автокорреляционная функция C_{zz} для z -составляющей спинов S_i^z :

$$C_{zz}(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_i S_i^z(t) S_i^z(t_w) \right\rangle \right] - \left[\left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_i S_i^z(t) \right\rangle \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_i S_i^z(t_w) \right\rangle \right] \quad (2)$$

где $N_s = \rho L^3$ — число спинов в решетке; угловые скобки обозначают статистическое усреднение по реализациям начального состояния, квадратные —

усреднение по примесным конфигурациям. Время ожидания t_w — время от момента приготовления образца до момента начала измерения его характеристик.

Графики на рис. 2 демонстрируют проявление эффектов старения в поведении автокорреляционной функции в виде замедления временного спада с ростом времени ожидания.

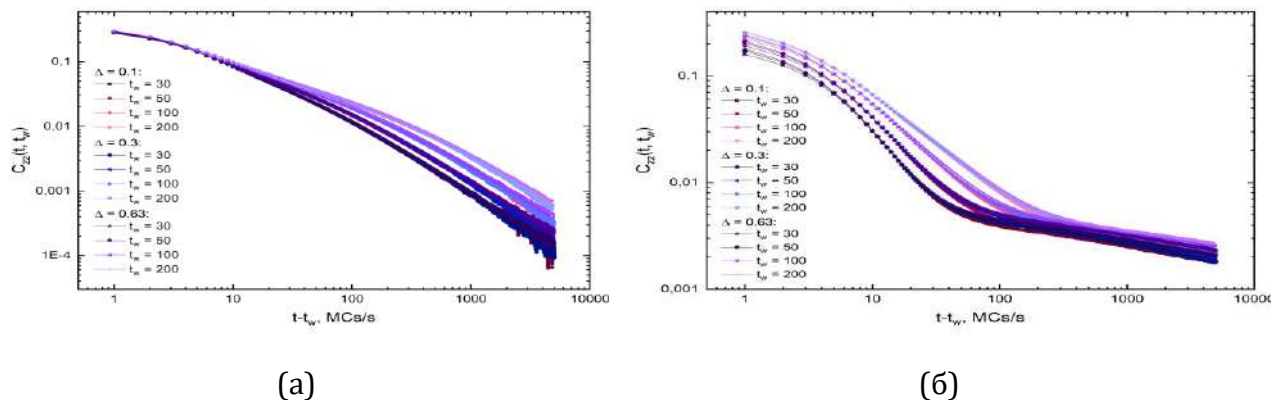


Рис. 2. Временная зависимость z -компонент автокорреляционной функции $C_{zz}(t, t_w)$ при временах ожидания $t_w = 30, 50, 100, 200$ MCs/s при эволюции из высокотемпературного $m_0 \ll 1$ (а) и низкотемпературного $m_0 = 1.0$ (б) начальных состояний.

На рис. 3 представлена скейлинговая зависимость автокорреляционной функции. Для случая эволюции из низкотемпературного начального состояния зависимость задана в виде $F_c(t/(t_w)^\mu)$. Рис. 3(б) демонстрирует проявление эффектов сверхстарения.

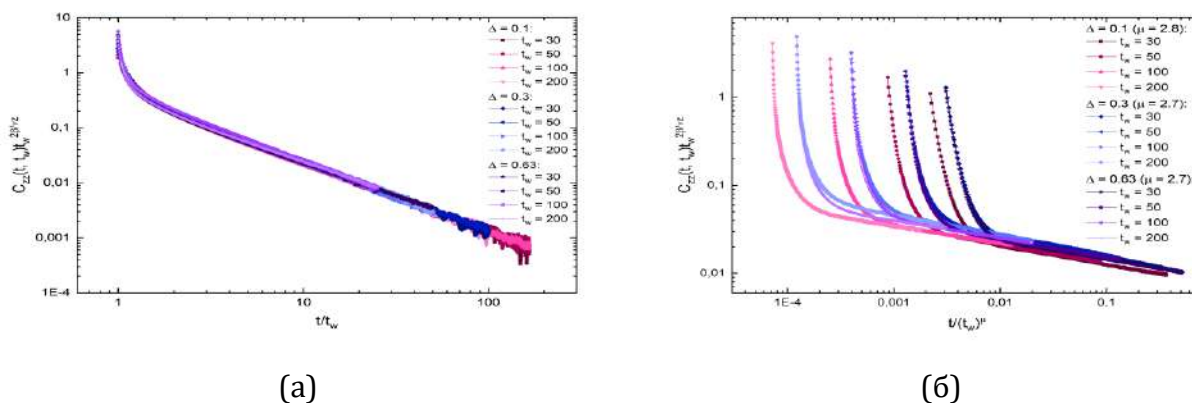


Рис. 3. Скейлинговая зависимость автокорреляционной функции при эволюции из высокотемпературного $m_0 \ll 1$ (а) и низкотемпературного $m_0 = 1.0$ (б) начальных состояний.

Результаты расчетов демонстрируют коллапс данных, полученных для различных t_w , на соответствующих универсальных кривых. Численный анализ результатов моделирования параметрической зависимости динамической восприимчивости от автокорреляционной функции позволил получить значения предельного ФДО, приведенными в таблице 2.

Таблица 2. Значения предельного ФДО для систем с различными Δ .

	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.3$	$\Delta = 0.63$
X_{HT}^{∞}	0.398(7)	0.400(8)	0.402(1) [2]

Полученные значения критических характеристик хорошо согласуются со значениями показателей и ФДО для слабо неупорядоченной модели Изинга [4]. Можно сделать вывод, что данные модели относятся к одному классу универсальности критического поведения. Исследования показывают, что величина параметра анизотропии в пределах погрешности не влияет на значения характеристик критического поведения слабо неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга, но приводит к ее изингоподобному поведению.

Список литературы:

1. Pelissetto A., Vicari E. Critical phenomena and renormalization-group theory // Physics Reports. 2002. Vol. 368. No. 6. P. 549 –727.
2. Прудников В.В., Прудников П.В., Хитринцева В.В. Неравновесное критическое поведение слабо неупорядоченной трехмерной анизотропной модели Гейзенберга// Вестн. Ом. ун-та. 2022. Т. 27, № 3. С. 16 – 26.
3. Прудников В.В., Прудников П.В., Лях А.С. Неравновесное критическое поведение трехмерной анизотропной модели Гейзенберга// Вестн. Ом. ун-та. 2019.Т. 24, № 3. С. 39 – 48.
4. Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Особенности неравновесного критического поведения модельных статистических систем и методы их описания // УФН. 2017. Т. 187. Вып. 8. С. 817-855.

Сведения об авторах:

Прудников Владимир Васильевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М.Достоевского», e-mail: prudnikov@mail.ru

Ковалева Александра Юрьевна — бакалавр 4 курса физического факультета ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», e-mail: mello_218@mail.ru

РАСЧЕТ ГЕОМЕТРИИ И ЭНЕРГИИ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ СОЕДИНЕНИЙ РЕАКЦИИ ГИДРИРОВАНИЯ ФУРФУРОЛА

А.Д. Леженина, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

CALCULATION OF GEOMETRY AND ENERGY OF INTERMEDIATE COMPOUNDS OF THE REACTION OF HYDROGENATION OF FURFURAL

A.D. Lezhenina, M.V. Mamonova

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Аннотация. Представлены результаты расчетов геометрической структуры и полной энергии промежуточных элементов при гидрировании фурфурола в водном растворе, который завершается циклизацией и образованием производной циклопентена. Квантово-химические расчеты были проведены в рамках теории функционала плотности с помощью пакета VASP и метода проекционных присоединённых волн (PAW).

Abstract. The results of calculations of the geometric structure and total energy of intermediate elements during the hydrogenation of furfural in an aqueous solution, which ends with cyclization and the formation of a cyclopentene derivative, are presented. Quantum-chemical calculations were carried out within the framework of the density functional theory using the VASP package and the method of projected augmented waves (PAW).

Ключевые слова: Фурфурол, фурфуриловый спирт, гидрирование, первопринципные расчеты, VASP.

Keywords: Furfural, furfuryl alcohol, hydrogenation, ab-initio calculations, VASP.

Фурфурол – альдегид с кольцевой структурой, химическая формула C_4H_3OCHO . Является ключевым промежуточным продуктом для широкого круга химических веществ. Его применяют в качестве растворителя в нефтехимической переработке. Также фурфурол является одним из важных промежуточных продуктов в производстве биотоплива [1]. Но из-за своей высокой реакционной способности фурфурол требует дальнейшей модернизации до более стабильных продуктов, чтобы включать их в состав бензина, дизельного топлива или использовать в качестве химикатов [2].

Целью данной работы является исследование маршрута химической реакции гидрирования фурфурола в водном растворе, где итоговым элементом является производная циклопентена.

На рис. 1 представлен маршрут, в котором отражены все химические реакции и промежуточные элементы. Все построенные и рассчитанные элементы были пронумерованы на рисунке для удобства. Повторение 4 и 7 элемента обусловлено тем, что они происходят без образования новых соединений.

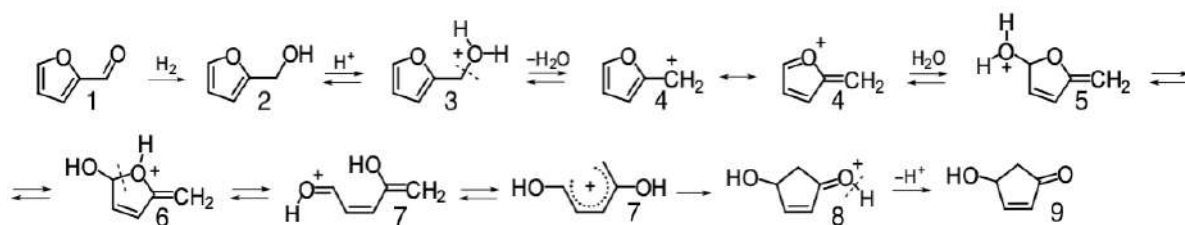


Рис. 1. Маршрут процесса гидрирования фурфуrolа в водном растворе.

Рис. 2 демонстрирует геометрическую структуру молекулы фурфуrolа, который является первым элементом в реакции на рис. 1, фурфуриловый спирт (второй элемент), промежуточной молекулы $C_4H_3OCH_2$ (четвертый элемент) заключительная молекула производная циклопентена.

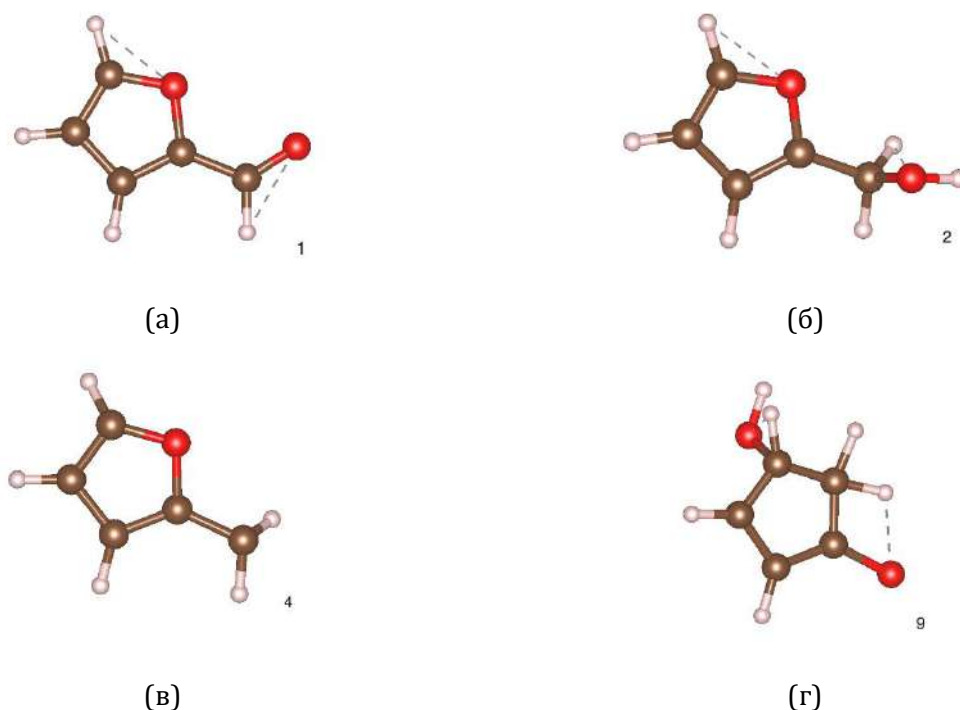


Рис. 2. Визуализация молекул (а) C_4H_3OCHO , (б) $C_4H_3OCH_2OH$, (в) $C_4H_3OCH_2$, (г) $CHOC_4H_5O$. Красным цветом обозначается атом кислорода, белым водорода, коричневым углерода.

Результаты расчетов значений полной энергии всех химических элементов участвующих в реакции на рис. 1, были получены с помощью программного комплекса VASP с оптимизацией геометрии молекулы и представлены на рис. 3.

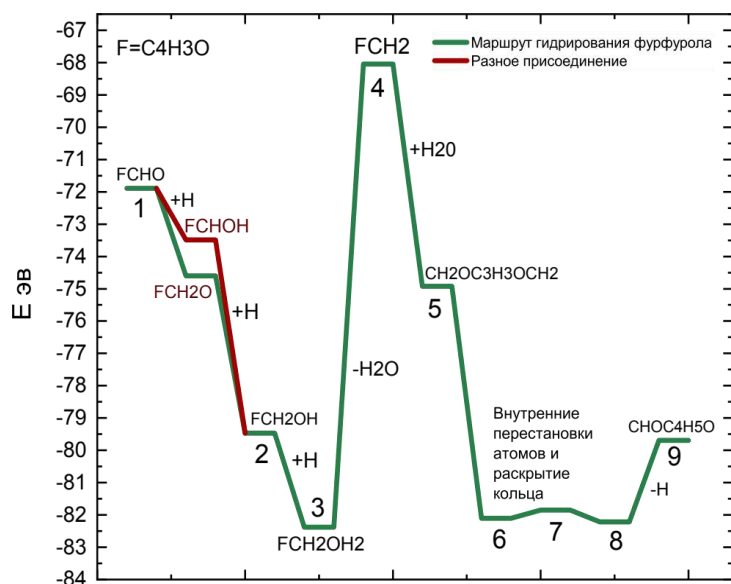


Рис.3. Значения полной энергии для промежуточных соединений реакции.

Где изображена зависимость полной энергии от координаты реакции для маршрута гидрирования фурфурола в водном растворе, в котором также протекают реакции гидролитического раскрытия фуранового кольца. Также на рис. 3 красной линией обозначен еще один возможный путь гидрирования фурфурола до фурфурилового спирта, появляющийся из-за того, что водород может присоединяться в различные позиции. Подробней это представлено в статье [3]. Для построения основной линии был выбран более энергетически выгодный путь, в котором сначала происходит образование связи C – H.

Данный маршрут является одним из вариантов маршрута реакции, в дальнейшем предполагается рассмотреть другие варианты для определения более энергетически выгодного.

Список литературы:

1. Serrano-Ruiz, J. C.; West, R. M.; Dumesic, J. A. *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.* 2010, 1, 79–100.
2. Chang, C.-C.; Green, S. K.; Williams, C. L.; Dauenhauer, P. J.; Fan, W. *Green Chem.* 2014, 16, 585–588.
3. Vorotnikov, V.; Mpourmpakis, G.; Vlachos, D. G. *DFT Study of Furfural Conversion to Furan, Furfuryl Alcohol, and 2-Methylfuran on Pd(111)*. *ACS Catal.* 2012, 2, 2496– 2504.
4. Wang, S.; Vorotnikov, V.; Vlachos, D. G. *Coverage-Induced Conformational Effects on Activity and Selectivity: Hydrogenation and Decarbonylation of Furfural on Pd(111)*. *ACS Catal.* 2015, 5, 104– 112.

Сведения об авторах:

Мамонова Марина Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М.Достоевского», e-mail: mamonovamv@omsu.ru.

Леженина Анастасия Денисовна – бакалавр 4 курса физического факультета ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», e-mail: Lezhenina.13@bk.ru

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

А. А. Чубарова, П.В. Прудников, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

MACHINE LEARNING METHODS FOR RESEARCH INTO PROMISING NANOMATERIALS

A.A. Chubarova, P.V. Prudnikov, M.V. Mamonova

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Аннотация. Представлены результаты исследования плёночной структуры FeAg двумя популярными методами машинного обучения: нейронной сетью и эволюционным алгоритмом USPEX. Получены результаты предсказания критической температуры фазового перехода и построена скейлинговая зависимость с использованием свёрточной нейронной сети. Получена кристаллическая структура с помощью эволюционного алгоритма USPEX.

Abstract. The results of the study of the FeAg film structure by two popular machine learning methods are presented: the neural network and the USPEX evolutionary algorithm. The results of the prediction of the critical phase transition temperature are obtained and the scaling dependence is constructed using a convolutional neural network. The crystal structure was obtained using evolutionary algorithm USPEX.

Ключевые слова: Машинное обучение, свёрточные нейронные сети, скейлинговые зависимости, первопринципные расчеты, эволюционный алгоритм, USPEX.

Keywords: Machine learning, convolutional neural networks, scaling relationships, first-principles computation, evolutionary algorithm, USPEX.

Получение новых наноматериалов, имеющих магнитную структуру с чередованием слоёв ферромагнитного слоя и немагнитного материала, является актуальной задачей физики конденсированного состояния [1]. Для исследования и получения таких наноматериалов применяются методы машинного обучения.

Целью данной работы провести исследование наноструктуры FeAg с применением различных методов машинного обучения. В данной работе будут представлены результаты с помощью свёрточной нейронной сети [2] и эволюционного алгоритма USPEX [3]. FeAg — структура, описываемая двумерной моделью Изинга. При рассмотрении данной статистической модели используется свёрточная нейронная сеть, позволяющая определить температуру фазового перехода. В данной работе рассматривался гамильтониан для квадратной решётки двумерной модели Изинга с состояниями спина $S = \pm 1$, соответствующих одному из двух состояний. Система имеет размер $N = L \times L$.

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (1)$$

где $J = 1$ – константа обменного взаимодействия, $J > 0$ для ферромагнитной модели.

Нейронная сеть обучалась на корреляционных матрицах [4], полученный путем обработки массивов спинов по формуле 2.

$$C_i = \frac{(S_{xy}S_{x+\frac{L}{2}y} + S_{xy}S_{x,y+\frac{L}{2}})}{2} \quad (2)$$

Где корреляционная функция учитывает взаимодействие спинов на расстоянии равным половине решётки, x, y - движения по осям.

На рис. 1 представлены результаты обучения нейронной сети для разных линейных размеров. Можно заметить, что с увеличением значения линейного размера пересечение вероятностей до и после фазового перехода уменьшает угол спада, что демонстрирует четкий переход в области критической температуры.

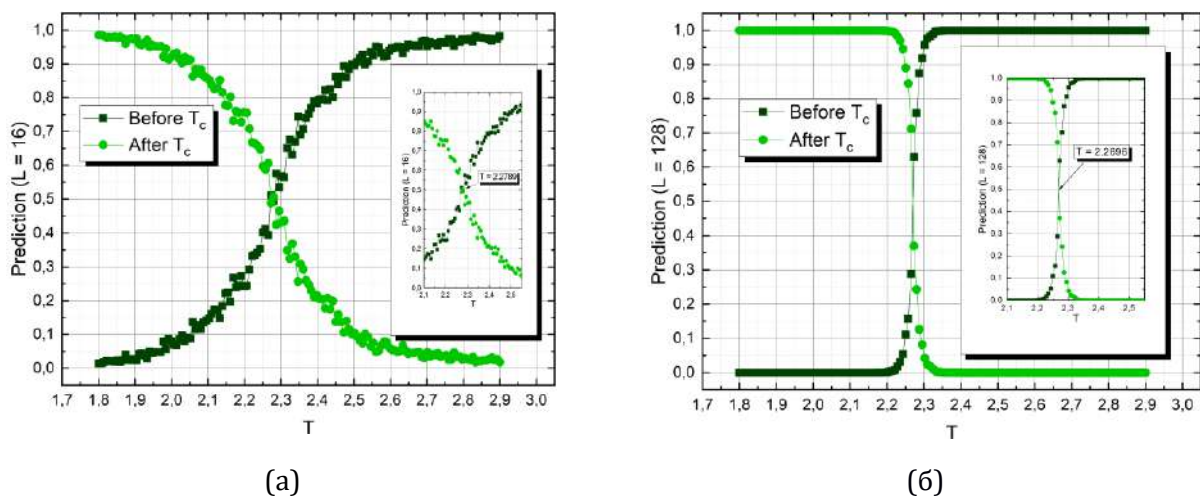


Рис. 1. Результаты обучения нейронной сети для линейных размеров $L = 16$ (а) и $L = 128$ (б).

На рис. 2. представлена скейлинговая зависимость, отражающая универсальное поведения для разных линейных размеров. Это говорит о том, что нейросеть демонстрирует корректные данные.

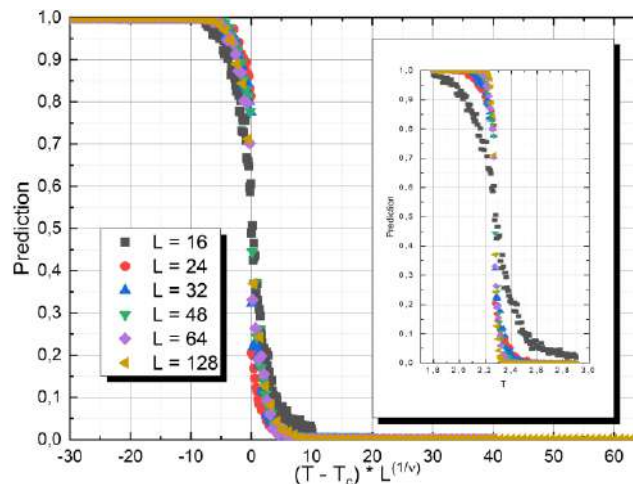


Рис. 2. Скейлинговая функция для двумерной модели Изинга, полученная с помощью нейронной сети.

Методы машинного обучения позволяют также получить приближенный к реальности вид кристаллической структуры и его структурные особенности. Такие алгоритмы способны работать с кристаллической структурой разной размерности. Такие алгоритмы реализованы в программном комплексе USPEX.

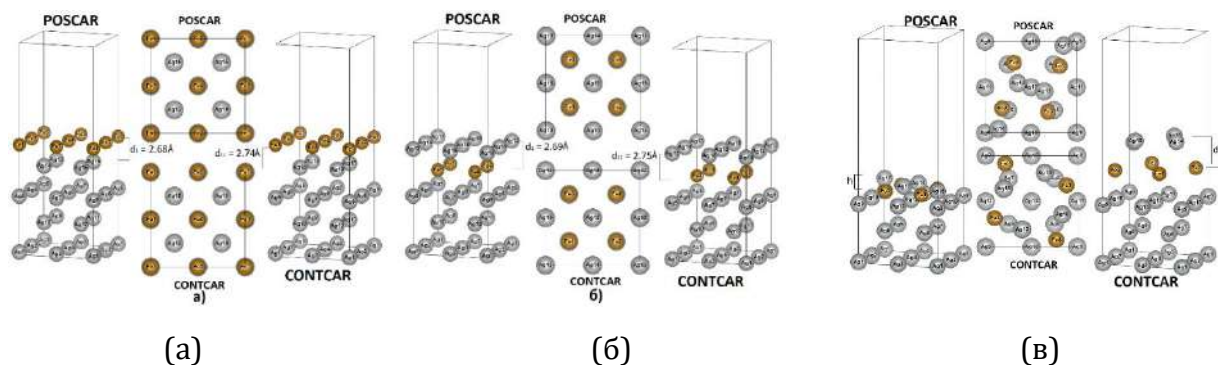


Рис.3. - Кристаллические структуры системы Fe/Ag в изометрической проекции и в проекции плоскости XY, до (POSCAR) и после (CONTCAR) расчётов с учётом релаксации, (а) «плёнка»; (б) «сэндвич»; (в) с учётом реконструкции и намагниченности атомов системы.

Исследование структуры FeAg проводилось программным комплексом USPEX с оптимизацией расчётов с помощью пакета первопринципных расчётов VASP [5] для расчётов структур с эффектами релаксации и реконструкции [6]. Система состояла из подложки (12 атомов Ag, по 4 атома в слое) и добавляемых атомов Fe и Ag (4 атома Fe, 4 атома Ag). Система рассматривалась с ориентацией поверхностной грани (100).

На рис. 3 представлены результаты предсказания кристаллической структуры FeAg. Представлены результаты моделирование с помощью программы VASP, а также программным комплексом USPEX. Предсказанная структура относится к структуре типа «Сэндвич», которая является наиболее энергетически выгодной для данной системы (таб.1)

Таблица 2. Значения полной энергии суперячейки для каждого типа расчёта с учёта намагниченности. E – полная энергия суперячейки с учётом намагниченности.

Тип расчёта	E, эВ	
	«Плёнка»	«Сэндвич»
Релаксация	-0.61971	-0.69360
Реконструкция	-0,54321	-0.64353

Таблица 3. Значения магнитных моментов для атомов Fe структуры типа «Сэндвич».

Номер атома Fe	Магнитный момент, μ_B	
	релаксация	реконструкция
1	2.927	3.173
2	2.927	2.923
3	2.927	2.923

4	2.927	2.978
---	-------	-------

В таблице 3 приведены значения магнитных моментов для двух типов эффектов. Можно заметить, что значения магнитных моментов при учете реконструкции зависят от положения атома и отличаются на 1-3%.

Список литературы:

1. Scheunert G., Heinonen O., Hardeman R., Lapicki A., Gubbins M., Bowman R. M. A review of high magnetic moment thin films for microscale and nanotechnology applications. // Appl. Phys. Rev. 2016. 3. - P. 011301-1 - 011301-44.

2. S. Leijnen, F. Veen, The Neural Network Zoo. // Proceedings, 2020, 47,9;

3. Glass C.W., Oganov A.R., Hansen N. USPEX – evolutionary crystal structure prediction. // Comp. Phys. Comm. 2006. 175, 713-720.

4. A.Azizi, M.Pleimling, A cautionary tale for machine learning generated configurations in presence of a conserved quantity.// Sci Rep, 2021, 11, 6395.

5. P.G. Kresse, J. Furthmuller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. // Phys. Rev., 1996, 54, 11169;

6. А. А Чубарова, М. В Мамонова Исследование эффектов релаксации и реконструкции при образовании плёнки железа на поверхности серебра // Вестн. Ом. ун-та. 2022. том 27, № 3 2022. С 27-32.

Сведения об авторах:

Чубарова Алина Аркадьевна – магистрант 1 года физического факультета ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», e-mail: ChubarovaAA@stud.omsu.ru

Прудников Павел Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», e-mail: PrudnikovPV@omsu.ru

Мамонова Марина Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики ФГАОУ ВО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского», e-mail: mamonova_mv@mail.ru