

Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации  
Федеральное государственное  
бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ  
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,  
НАНОСТРУКТУР  
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

***МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ***

**выпуск 10**

**ТВЕРЬ 2018**

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

**Официальный сайт издания в сети Интернет:  
[www.physchemaspects.ru](http://www.physchemaspects.ru)**

**Ф50** Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2018. – Вып. 10. – 708 с.

ISBN 978-5-7609-1395-1

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1395-1

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2018  
© Тверской государственной  
университет, 2018

УДК 544.022.22:[546.3-14:546.3-161]

## **ВЛИЯНИЕ ГИДРИРОВАНИЯ НА ПРОЦЕССЫ СТРУКТУРИРОВАНИЯ И СТЕКЛОВАНИЯ ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ РАСПЛАВОВ**

В.А. Полухин, Э.Д. Курбанова, Р.М. Белякова, Л.К. Ригмант  
ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»  
620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101  
*p.valery47@yandex.ru*

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.535

**Аннотация:** Рассмотрены характеристики и процессы структурирования аморфных и нанокристаллических сплавов – бинарных и тройных на основе  $Pd$ , а также высокоэнтропийных многокомпонентных  $Zr-Cu (Ni, Ti)$ , на основе бинарных  $Ni-Ti$ ,  $Ni-V$  и тройных  $Zr-Cu-Ti$ , не смотря сложность получения их применение может существенно повысить экономическую эффективность процессов выделения, очистки водорода и его безопасное хранение. Проведен также анализ особенностей формирования функциональных структур мембранных сплавов в зависимости от их способности к гидридообразованию.

*Ключевые слова:* молекулярная динамика, металлические стекла, стеклование, нанокристаллические сплавы, переходные металлы, гидрирование, кластеры, ближнее упорядочение, средний и дальний порядок.

### **1. Введение**

В настоящее время определенные успехи достигнуты с применением *ab initio* расчетов, а также комбинированием молекулярно-динамического (МД) моделирования и теории функционала плотности (*embedded atom model* – ЕАМ) [1]. Исследованиями транспортных свойств в предкристаллизационных состояниях – диффузии и вязкости на стадиях переохлаждения и стеклования расплавов выявлены специфические переходы, механизм которых определяется динамикой поперечных мод и классифицируемые как динамические кроссоверы  $T_D$ , предшествующие «температурным интервалам структурных кроссоверов,  $T_A$ », непосредственно связанных с мезомасштабными процессами конфигурационных изменений (*mediate ordering* – среднего порядка, с интервалом  $L_{Med}$  [2]), за которыми следуют температурные интервалы стеклования  $T_g \sim T_A/2$  ( в альтернативе и кристаллизации). Эти переходы четко фиксируются для металлических систем с наличием ковалентных, гибридирующихся связей и ориентационного упорядочения, не говоря уже о подобных переходах для стеклования обычных стекол (к примеру,  $Al_2O_3 - Y_2O_3$ ) и для переохлажденных расплавов  $BeF_2$ ,  $Ge$ ,  $Ce-Al$ , а также аморфизирующихся металлических систем. Эти не столь явно проявляющиеся трансформации, условно характеризуемые как «конфигурационно-энергетические» перестройки, в первую очередь связаны не только со структурными изменениями, но и с существенным

изменением частотных спектров – с появлением в них короткоживущих или виртуальных мод (сетки мезомасштабных волновых возбуждений  $k = 2\pi/L_{Med}$  – экситонов, в отличие от фононов с модами масштаба кристаллитов).

Палладий и его сплавы хотя и зарекомендовали себя как превосходные мембранные материалы [3, 4]) в процессах получения сверхчистого водорода, однако являются дорогостоящими. Поэтому мы рассмотрим и другие сплавы (на основе бинарных систем  $Zr-Cu(Ni, Ti)$ ,  $Ni-Ti$ ,  $Ni-V$ ,  $Zr-Cu-Ti$  и многокомпонентных), применение которых повышают экономическую эффективность производственных процессов выделения и очистки водорода [5].

## 2. Влияние водорода на динамику стеклования и процессы наноструктурирования сплавов

При стекловании расплавов  $Fe_{1-x}P_x$ ,  $Pd_{1-x}Si_x$ ,  $Cu_{55}Zr_{45}$ ,  $Cu_{64}Zr_{36}$ ,  $Pd_{40}Cu_{40}P_{20}$ ,  $Zr_{55}Ni_{10}Cu_{35}$ ,  $Cu_{55}Ti_{35}Zr_{10}$ ,  $La-Al-Ni$ ,  $Mg-Cu-Y$ , а также с более сложными составами  $Pd_{40}Cu_{30}Ni_{10}P_{20}$ ,  $Zr-Ni-Al-Cu$ ,  $Zr_{57}Nb_5Al_{10}Cu_{15,4}Ni_{12,6}$ ,  $Zr_{41,2}Ti_{13,8}Cu_{10,0}Ni_{12,5}Be_{22,5}$ , отмечено наличие предпиков в коротковолновой ( $k$ ) области – слева от главных структурных факторов ( $S(k)$ , слабо выраженное для сплава  $Fe_{1-x}B_x$ ), как свидетельство структурирования с формированием среднего порядка. Для процессов стеклования-плавления сплава  $Zr_{41,2}Ti_{13,8}Cu_{10,0}Ni_{12,5}Be_{22,5}$  экспериментально выявлены характерные особенности на кривых температурной зависимости теплоемкости в жидкофазной области, как следствие девитрификации и плавления с тепловым эффектом [2]. Процессам стеклования-кристаллизации этого расплава сопутствовал гистерезис в  $k$  малой области (на левой ветви)  $S(k)$ . Исходя из анализа автокорреляционных функций Ван-Хова и кинетических характеристик – вязкости и диффузии моделирования стеклования глубоко переохлажденных расплавов  $T_{A(1)}-Cu_{55}Ti_{35}Zr_{10}$  и  $T_{A(2)}-Cu_{55}Zr_{45}$  ( $T_{A(1)}$  и  $T_{A(2)}$  соответствующие этим сплавам структурные кроссоверы) удалость четко выявить границы динамических  $T_D$  и структурных кроссоверов  $T_A$  (см. рис. 1). Изменение кинетических процессов в этих сплавах связано с высокой плотностью локализованных атомов и преобладание осцилляционных движений (обусловленных «кейдж-эффектами» [2]) над поступательными кооперативными (характерными для расплавов). Выявленный интервал как раз и соответствует «структурно-динамическим кроссоверам ( $T_D > T_A$ ) (с другими механизмами и как некая альтернатива фазовым переходам) с

достижением мезомасштабной кластерной взаимокоординации (структурирования «кластеров вокруг кластеров»), локализации атомной динамики (высокой плотности «кейдж-эффектов»), неаррениусовского замедления диффузионных процессов и резкого роста вязкости (со значениями в разрез с классическим соотношением Стокса–Эйнштейна ( $D_T \sim \eta^{-1}$ ) при температурах  $T < T_A$ ).

Выявленная нами при МД-моделировании высокая регулярность функций распределения для разноименных атомов в бинарных стеклах на основе переходных металлов и металлоидов (существенно с разными размерами атомов) и с наличием с гибридизацией  $sp$ – и  $d$ –орбиталей есть результат когерентного сращивания и регулярного икосаэдрического координирования уже не атомов, а центрированных (кремнием стекла  $Pd_{80}Si_{20}$ ) нанокластеров вокруг таких же кластеров, выбранных за центры [2]. Почти при полном отсутствии первых – главных пиков у парциальных ФРП, соответствующих центрирующим атомам (элементов аморфизаторов), хорошо разрешенными оказываются пики их третьих и отчасти четвертых координационных оболочек, т.е. с приближением к масштабу среднего порядка (1,5 нм).

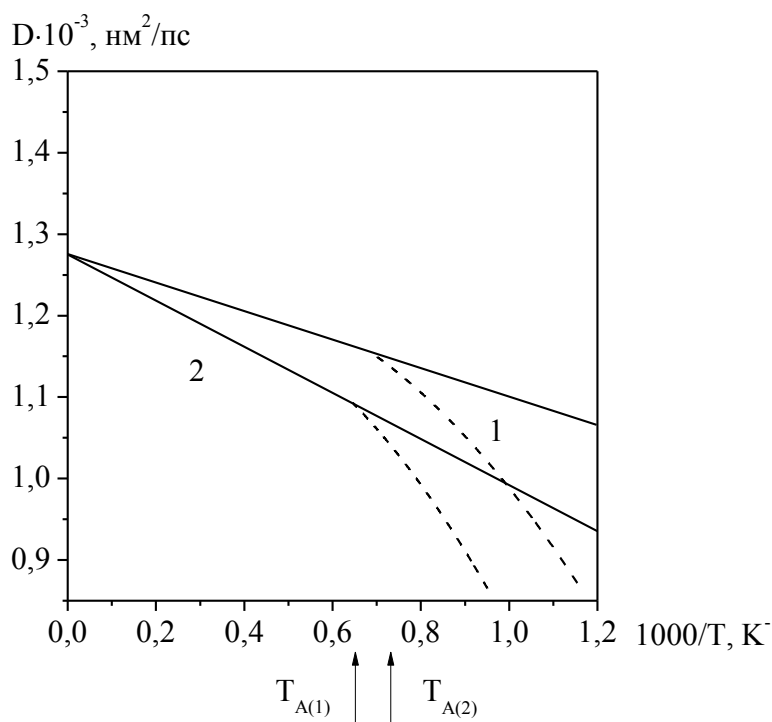


Рис. 1. Отклонения, как кроссоверы в интервале  $T_A$  – структурный и предшествующий ему динамический ( $T_D < T_A$ ) – функции от обратной температурной зависимости диффузии на примере стеклования расплавов ( $T_{A(1)} - Cu_{55}Ti_{35}Zr_{10}$  и  $T_{A(2)} - Cu_{55}Zr_{45}$ ) в области аномального изменения диффузии (не соответствующей зависимости Аррениуса).

В рассматриваемых нами МД-моделей гидрированных аморфных сплавов  $a\text{-H}:Pd_{80}Si_{20}$ ,  $a\text{-H}:Pd_{40}Cu_{40}P_{20}$ ,  $a\text{-H}:Fe_{80}B_{20}$ ,  $a\text{-H}:Fe_{80}P_{20}$  (как и для  $a\text{-H}:Fe$  и  $a\text{-H}:PdH$ ) характерно перераспределение межатомных расстояний  $Me-Me$ , вызванное воздействием диффундирующих экранированных протонов (по типу  $H^{+\delta}$  и  $H^{-\delta}$ , при  $x < 1$ ,  $+\delta = 1 - x$ ;  $-\delta = 1 - y$ , при  $y > 1$ ) с преодолением «седловых» конфигураций-треугольников (из атомов металла) с каналированием через наименьшие сечения. Интенсивная подвижность водорода и вызванные им деформации седловых координаций почти не сказывается на форме главных парциальных пиков функции радиального распределения атомов (ФРРА) металлов (и сплавов,  $H: Pd_{80}Si_{20}$  [2, 5-8]), но проявляется на статистике межатомных расстояний во вторых координациях – инверсией высот субпиков второго пика (следующего за главным пиком ФРРА  $PdH$ ) с заметным превышением его правого субпика над левым. Присутствие водорода влияет не только на диффузионную подвижность атомов в рассматриваемых сплавах, но видоизменяет масштабы температурно-временных интервалов кроссоверов и стеклования – для систем закрытого типа по отношению к водороду (т.е. гидриридобразующих) – сдвигая упомянутые интервалы в сторону повышенных температур, а для открытых систем (не гидридообразующих) – существенным снижением температур (проявлением усиления жидкофазной метастабильности, т.е. и более глубокого переохлаждения расплава – на основе  $Fe-B$  – сдвиги более 200 К), в обоих случаях с существенным снижением и скоростей охлаждения [2, 8]. Эти эффекты проявляются и в отношении гидрированных аморфных сплавов, так для  $a\text{-H}:Pd_{80}Si_{20}$  отмечено почти двукратное снижением диффузионной подвижности атомов кремния, учитывая его склонность к гидрированию и сеткообразованию вплоть до формирования специфической нанофазы, с появлением на диффузном гало аморфной дифрактограммы яркого светящегося кольца [2, 6-10].

### 3. Заключение

Итак, согласно анализу результатов моделирования (МД и квантовой динамики) чистых металлов, как и рассматриваемых нами бинарных сплавов следует, что уже на этапе температурных интервалов переохлаждения расплавов (350–500 К) и в области стеклования доля икосаэдрических координаций в формируемых кластерных конфигурациях аморфных сплавов возрастает до 80%. Соответственно, из них – доля многогранников Вороного метрически регулярных  $\langle 0,0,12,0 \rangle$  возрастает с 13,5 до 30,5%, а наименее искаженных растет более медленно. Важно, что переходные металлы с не заполненными (менее половины) электронных

$d$ -уровней зонной структуры хорошо абсорбируют водород, образуя гидриды инициирующие более масштабную кластеризацию и сеточные подструктуры. МД-моделированием аморфного  $Fe$  выявлен эффект – аномальной инверсии расщепления вторых пиков его ФРРА – с более высоким правым «подпиком». Это свидетельствовало о существенном уменьшении вкладов во вторые пики парных расстояний, характерных для треугольных координаций, при прохождении которых атомами водорода нами фиксировалось самое высокое торможение движущихся водородных протонов. И это было позднее подвержено нами экспериментально для стекол – на основе железа и палладия [4, 6, 11-13]. Для гидридов циркония  $Zr$  { $\gamma$ - $ZrH$ ,  $\varepsilon$ - $ZrH_2$ ,  $\delta$ - $ZrH_{1,66}$ } характерны упаковки мезоупорядочения, соответствующие структурам ГЦК ( $\delta$  – гидриды) и ГЦТ ( $\gamma$  и  $\varepsilon$  – гидриды) [14]. Процесс формирования фаз  $Zr_{1-z}Cu_x$  в сплаве  $Cu_{55}Ti_{35}Zr_{10}$  нами зафиксирован в области пониженных температур, как следствие стабилизирующего влияния  $Ti$  на фазообразования с цирконием. Наличие  $Ti$  способствовало уширению плато между двумя главными пиками DSC-термограммы (differential scanning calorimetry) и сохранению стабильной аморфной структуры.

*Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 18-10-3-28) и программой фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-7-3-15).*

### **Библиографический список:**

1. **Polukhin, V.A.** Stability and thermal evolution of transition metal and silicon clusters / V.A. Polukhin, N.A. Vatolin // Russian Chemical Reviews. – 2015. – V. 84. – № 5. – P. 498-539.
2. **Полухин, В.А.** Предкристаллизационные изменения структурно-динамических характеристик аморфизируемых металлических расплавов при глубоком охлаждении, стекловании и гидрировании / В.А. Полухин, Н.И. Сидоров, Н.А. Ватолин // Расплавы. – 2018. – № 5. – С. 495-534.
3. **Al-Mufachi, N.A.** Hydrogen selective membranes: A review of palladium-based dense metal membranes / N.A. Al-Mufachi, N.V. Rees, R. Steinberger-Wilkens // Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2015. – V. 47. – P. 540-551.
4. **Pastukhov, E.A.** Short order and transport in amorphous palladium materials / E.A. Pastukhov, N.I. Sidorov, V.A. Polukhin, V.P. Chentsov // Defect and Diffusion Forum. – 2009. – V. 283-286. – P. 149-154.
5. **Okamoto, H.**  $Cu-Zr$  (copper-zirconium) / H. Okamoto // Journal of Phase Equilibria and Diffusion. – 2008. – V. 29. – I. 2. – P. 204-204.
6. **Vatolin, N.A.** Simulation of the influence of hydrogen on the structural properties of amorphous iron / N.A. Vatolin, V.A. Polukhin, R.M. Belyakova, E.A. Pastukhov // Materials Science and Engineering. – 1988. – V. 99. – I. 1-2. – P. 551-554.
7. **Polukhin, V.A.** Influence of the diffusion motion of hydrogen on the structure of iron in

- the crystalline, liquid, and amorphous states / V.A. Polukhin, R.M. Belyakova, N.A. Vatolin, E.A. Pastukhov // Doklady Akademii Nauk SSSR. – 1987. – V. 296. – №. 3. – P. 591-595.
8. **Cheng, Y.Q.** Atomic level structure and structure–property relationship in metallic glasses / Y.Q. Cheng // Progress in Materials Science. – 2011. – V. 56. – I. 4. – P. 379-473.
9. **Dolan, M.D.** Hydrogen transport through  $V_{85}Ni_{10}M_5$  alloy membranes / M.D. Dolan., G. Song, D. Liang et al // Journal of Membrane Science. – 2011. – V. 373. – I. 1-2. – P. 14-19.
10. **Suryanarayana, C.** Bulk metallic glasses / C. Suryanarayana, A. Inoue. – 2nd ed. – Boca Raton, London, New York: CRC Press. Taylor&Francis Group, 2017. – 520 p.
11. **Hao, S.** Computational prediction of durable amorphous metal membranes for  $H_2$  purification / S. Hao, D.S. Sholl // Journal of Membrane Science. – 2001. – V. 381. – I. 1-2. – P. 192-196.
12. **Sholl, D.S.** Dense metal membranes for the production of high-purity hydrogen / D.S. Sholl, Y.H. Ma // MRS Bulletin. – 2006. – V. 31 – I. 10. – P. 770-773.
13. **Ockwig, N.W.** Membranes for hydrogen separation / N.W. Ockwig, T.M. Nenoff // Chemical Reviews. – 2007. – V. 107. – I. 10. – P. 4078-4110.
14. **Zander, D.** Hydrogenation of Zr based metallic glasses and quasicrystals / D. Zander, H. Leptien, U. Koster, N. Eliaz, D. Eliezer // Journal of Non-Crystalline Solids. – 1999. – V. 250-252. – Part 2. – P. 893-897.
15. **Валиев, Р.З.** Объемные наноструктурные материалы: фундаментальные основы и применения / Р.З. Валиев, А.П. Жилияев, Т.Дж. Лэнгдон пер. с англ. Ю. В. Баженовой, О.Ю. Кураповой, А.А. Мартюшевой; под ред. И.В. Александрова, Р.З. Валиева. – СПб.: Эко-Вектор, 2017. – 480 с.

#### References:

1. **Polukhin, V.A.** Stability and thermal evolution of transition metal and silicon clusters / V.A. Polukhin, N.A. Vatolin // Russian Chemical Reviews. – 2015. – V. 84. – № 5. – P. 498-539.
2. **Polukhin, V.A.** Predkristallizacionnye izmeneniya strukturno-dinamicheskikh karakteristik amorfizuemyykh metallicheskih rasplavov pri glubokom ohlazhdenii, steklovanii i gidrirovanii / V.A. Polukhin, N.I. Sidorov, N.A. Vatolin // Rasplavy. – 2018. – no. 5. – P. 495-534.
3. **Al-Mufachi, N.A.** Hydrogen selective membranes: A review of palladium-based dense metal membranes / N.A. Al-Mufachi, N.V. Rees, R. Steinberger-Wilkens // Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2015. – V. 47. – P. 540-551.
4. **Pastukhov, E.A.** Short order and transport in amorphous palladium materials / E.A. Pastukhov, N.I. Sidorov, V.A. Polukhin, V.P. Chentsov // Defect and Diffusion Forum. – 2009. – V. 283-286. – P. 149-154.
5. **Okamoto, H.** Cu–Zr (copper-zirconium) / H. Okamoto // Journal of Phase Equilibria and Diffusion. – 2008. – V. 29. – I. 2. – P. 204-204.
6. **Vatolin, N.A.** Simulation of the influence of hydrogen on the structural properties of amorphous iron / N.A. Vatolin, V.A. Polukhin, R.M. Belyakova, E.A. Pastukhov // Materials Science and Engineering. – 1988. – V. 99. – I. 1-2. – P. 551-554.
7. **Polukhin, V.A.** Influence of the diffusion motion of hydrogen on the structure of iron in the crystalline, liquid, and amorphous states / V.A. Polukhin, R.M. Belyakova, N.A. Vatolin, E.A. Pastukhov // Doklady Akademii Nauk SSSR. – 1987. – V. 296. – №. 3. – P. 591-595.
8. **Cheng, Y.Q.** Atomic level structure and structure–property relationship in metallic glasses / Y.Q. Cheng // Progress in Materials Science. – 2011. – V. 56. – I. 4. – P. 379-473.

9. **Dolan, M.D.** Hydrogen transport through  $V_{85}Ni_{10}M_5$  alloy membranes / M.D. Dolan., G. Song, D. Liang et al // Journal of Membrane Science. – 2011. – V. 373. – I. 1-2. – P. 14-19.
10. **Suryanarayana, C.** Bulk metallic glasses / C. Suryanarayana, A. Inoue. – 2nd ed. – Boca Raton, London, New York: CRC Press. Taylor&Francis Group, 2017. – 520 p.
11. **Hao, S.** Computational prediction of durable amorphous metal membranes for  $H_2$  purification / S. Hao, D.S. Sholl // Journal of Membrane Science. – 2001. – V. 381. – I. 1-2. – P. 192-196.
12. **Sholl, D.S.** Dense metal membranes for the production of high-purity hydrogen / D.S. Sholl, Y.H. Ma // MRS Bulletin. – 2006. – V. 31 – I. 10. – P. 770-773.
13. **Ockwig, N.W.** Membranes for hydrogen separation / N.W. Ockwig, T.M. Nenoff // Chemical Reviews. – 2007. – V. 107. – I. 10. – P. 4078-4110.
14. **Zander, D.** Hydrogenation of Zr based metallic glasses and quasicrystals / D. Zander, H. Leptien, U. Koster, N. Eliaz, D. Eliezer // Journal of Non-Crystalline Solids. – 1999. – V. 250-252. – Part 2. – P. 893-897.
15. **Valiev, R.Z.** Ob"emnye nanostrukturnye materialy: fundamental'nye osnovy i primeneniya / R.Z. Valiev, A.P. Zhilyaev, T.Dzh. Lengdon per. s angl. Yu. V. Bazhenovoj, O.Yu. Kurapovoj, A.A. Martyushevoj; pod red. I.V. Aleksandrova, R.Z. Valieva. – St.-Peterburg: Eko-Vektor, 2017. – 480 p.

#### **THE EFFECT OF HYDROGENATION ON THE PROCESSES OF STRUCTURING AND VITRIFICATION OF SUPPERCOOLED MELTS**

V.A. Polukhin, E.D. Kurbanova, R.M. Belyakova, L.K. Rigmant

*Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences*

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.535

**Abstract:** There have been considered the characteristics and structure forming of amorphous and nanocrystalline binary and ternary alloys based on Pd, as well as high-entropy Zr–Cu (Ni,Ti) compositions based on binary Ni–Ti, Ni–V and ternary Zr–Cu–Ti systems, which are difficult to manufacture, however, can significantly improve the economic efficiency of the processes of separation, purification of hydrogen and its safe storage. The analysis of the formation specificities of stable functional structures of membrane amorphous and nanocrystalline alloys in depending on their ability to hydride formation was also carried out.

**Keywords:** *molecular dynamics, metallic glasses, vitrification, nanocrystalline alloys, transition metals, hydrogenation, clusters, short-range ordering, medium and long-range order.*

*Полухин Валерий Анатольевич – д.ф.-м.н., главный научный сотрудник ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»*

*Курбанова Эльмира Джумиудовна – к.ф.-м.н., научный сотрудник ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»*

*Белякова Римма Михайловна – к.т.н., старший научный сотрудник ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»*

*Ригмант Людмила Климентьевна – младший научный сотрудник, ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»*

*Valeriy A. Polukhin – Dr. Sc., Chief Researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences*

*Elmira J. Kurbanova – Ph. D., Researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences*

*Rimma M. Belyakova – Ph. D., Senior Researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences*

*Lyudmila K. Rigmant – Junior Researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences*