

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Председатели:

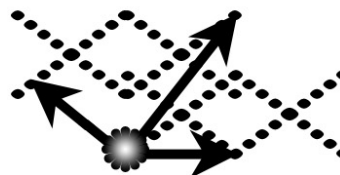
проф. Бушуев Владимир Алексеевич

проф. Лебедев Александр Иванович

проф. Казанский Андрей Георгиевич

доц. Орешко Алексей Павлович

доц. Ормонт Михаил Александрович



### INVESTIGATION OF THE DESTRUCTION PROCESS OF MATERIALS BY ELECTRO-PHYSICAL NON-DESTRUCTIVE TESTING AND DIFFRACTION OF THERMAL NEUTRONS

Ayman A.A.G.<sup>1</sup>, Surin V.I.<sup>1</sup>, Bokuchava G.D.<sup>2</sup>, Papushkin I.V.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, Russia

<sup>2</sup>Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

E-mail: gazal.ayman@yandex.ru, visconst@rambler.ru,  
gizo@nf.jinr.ru, piv@nf.jinr.ru

The process of destruction of a sample of brass-59 at high degree of deformation is investigated. The results of physical and mechanical tests for failure in the range of applied stresses 50÷500 MPa obtained synchronously by two experimental methods: scanning contact potentiometry (SCP) and thermal neutron diffraction (Fig.1).

Neutron diffraction experiments were carried out on the Fourier stress diffractometer FSD at the pulsed fast reactor IBR-2 in the Frank laboratory of neutron physics in Joint institute for nuclear research (Dubna city) [1]. The sample was subjected to an external uniaxial tensile load *in situ* in a neutron beam using the LM-29 testing machine. The diffraction spectra at each load value on the sample were recorded by detectors at the scattering angles  $2\theta = \pm 90^\circ$ .

Potentiometric measurements are performed using the *Spectroelph-FRR* desktop instrument designed for spectral analysis of electrical signals, In the laboratory *ElphysLAB*, National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), developed a desktop placement device for spectral analysis of functional diagnostics electrophysical signals *Spectroelph*. The device is intended for use when working on materials testing machine with horizontally mounted specimens [2].

The device works in conjunction with the hardware and software complex of the mobile diagnostic system located on the laptop *Asus x554l*. A programmable amplitude discriminator (PAD) of measuring signals with an adjustable scale of amplitude discrimination in the range of 40 dB was developed for measurements in the mode of automated detection. The discriminator cuts off the values of the signal amplitude exceeding the specified level, which allows studying the distribution of the surface electric potential at different structural levels of the signal (SLS).

Use SCP method opens up opportunities to study surface stresses distribution and deformations, mechanisms of plastic deformation, stages of development of internal defects leading to material destruction, and other physical processes [3].

During materials testing, the scanning transducer slides translationally in the horizontal direction along sample surface. This was achieved by screw mechanism and mechanical actuator from stepper motor. The carriage with the electro-physical sensor moves forward along two cylindrical rails. Three supports rotation are used on each side of a screw mechanism, and rails. Measuring rod, telescopic type, with a needle transducer is mounted on the console and pressed to the surface of sample by load, fixed on the spiral spring. The main technical char-

acteristics of Spectroelph are shown in the table, information-measuring system with the device shown in figure 2.

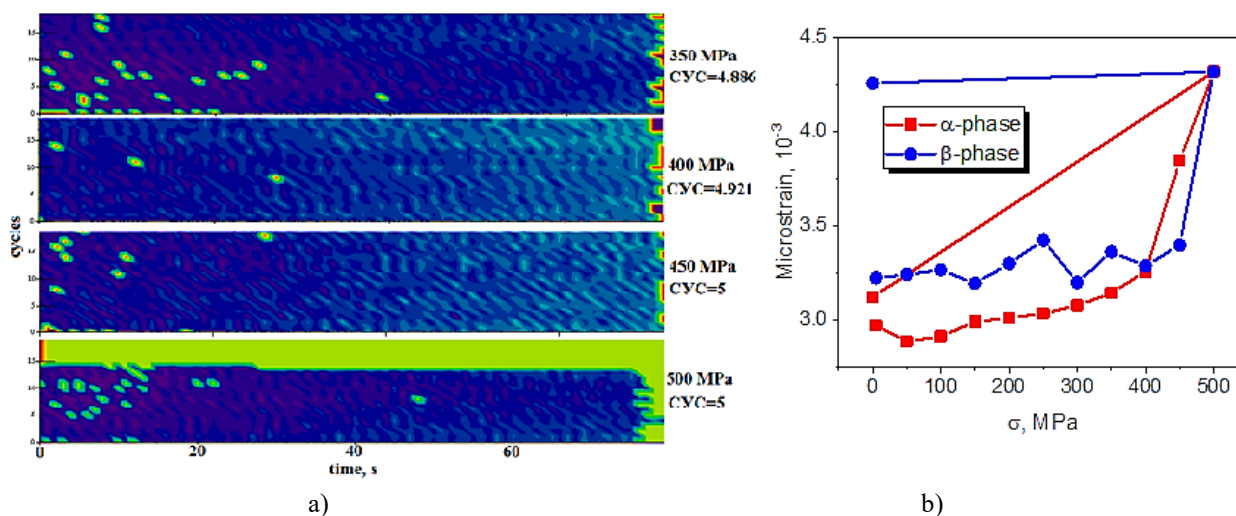


Fig.1 a): Linear-time potentiograph of sample surface brass-59 in loading range (350 to 500 MPa) in the band of SLS «4.886», «4.921», «5».

b): Averaged over all (*hkl*) micro-deformation, estimated from the broadening of diffraction peaks.

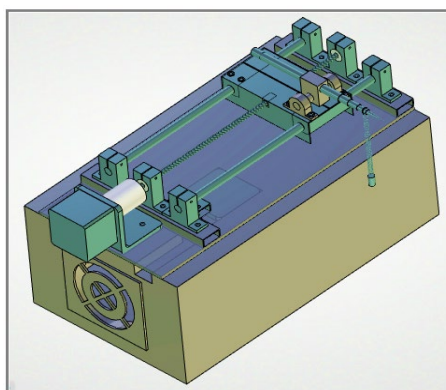


Fig.2. Device for spectral analysis of electro-physical diagnostic signals *Spectroelph-FRR*.

## References

1. G.D. Bokuchava, V.L. Aksenov, A.M. Balagurov et al, «Neutron Fourier diffractometer FSD for internal stress analysis» // Materials Science & Processing,- Germany, 2002.
2. V.I. Surin, A.A. Abu Ghazal, E.V. Voloshin, E.Y. Telnov, D.O. Titovets, «Device's for measuring contact surface stress»// Journal of Advanced Research in Technical Science, - North Charleston 2017.
3. A.A. Abu Ghazal, Bokuchava, G.D. I.V. Papushkin, V.I. Surin, Testing of austenitic steel H18N10T for destruction using scanning contact potentiometry and thermal neutron diffraction. - In Sat: Doc. XIII International Scientific and Practical Conference "The Future of Atomic Energy - Atomfuture". Obninsk: IATE NRNU MEPI, 2017, p. 11-13.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ИНТЕРКАЛЯТА $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3 \cdot 0.5 \text{NH}_2\text{C}_5\text{H}_4\text{N}$ РОМБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

Рагимли А.Б.

Институт физики НАН, Азербайджан  
E-mail: aysel.nuriyeva5@gmail.com

В работе исследованы структурные и оптические свойства слоистых кристаллов ромбической сингонии  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$  и их интеркалятов с молекулами 4-аминопиридина.

Нами было исследовано, что деинтеркаляция начиная при 250°C происходит в двух стадиях и в 345°C происходит полное удаление молекул 4-АП.

Слоистые матричные кристаллы, выбранные для интеркаляции относятся ромбической сингонии и имеют оригинальную структуру. Эти кристаллы в светло-желтом цвете и прозрачны.

Известно что, кристаллы большинство слоистых халькогенидов относятся к гексагональной сингонии и характеризуются структурами плотно упакованного типа. Строительными блоками таких структур являются двумерно бесконечные пакеты, состоящих из несколько чередующихся анион-катион слоев типа А-К-...-А. Повторение подобных пакетов перпендикулярно слоям формирует трехмерную структуру. При этом, связь между соседствующими пакетами является Ван-дер-ваальсовый, и образуются между анионами крайних слоев. Однако в кристаллах ромбической сингонии  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$  пространство между пакетами имеет форму зиг-заг (рис. 1. а).

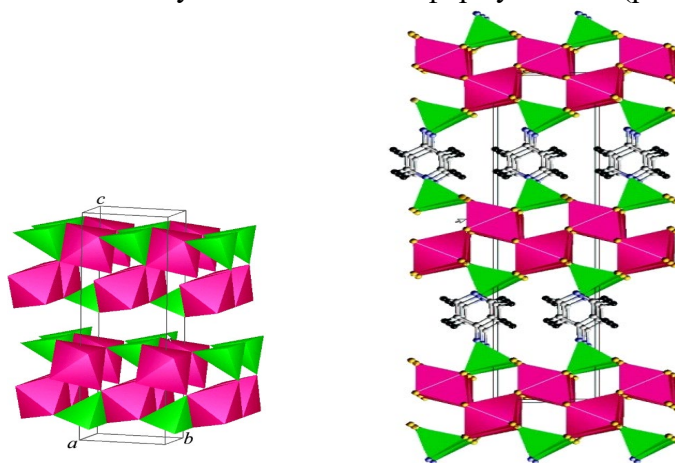


Рис 1.а Структура орторомбической фазы соединения  $\text{GaInS}_3$ .  
Рис 1.б Кристаллическая структура интеркалята  $\text{GaInS}_3 \cdot 0.5\text{NC}_5\text{H}_4\text{NH}_2$ .

В результате интеркаляции, молекулы 4-АП встраиваются между пакетами, которые сформированы из пяти атомными слоев S-(Ga,In)-S-(Ga,In)-S. В результате параметр  $c$  увеличился от  $c_0 = 19.06 \text{ \AA}$  до  $c_{int} = 30.90 \text{ \AA}$  (рис. 1. б). Изменение параметра составило  $\Delta c = 11.84 \text{ \AA}$ , в процентах  $\sim 62\%$  [1]. Согласно определению самого понимания интеркаляции, структура пакета матричных кристаллов не должны изменяться и процесс должен быть обратимым. Поэтому авторы предполагали, что при интеркаляции структура пакетов S-(Ga,In)-S-(Ga,In)-S матричного кристалла  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$  не изменятся. Но анализ кристаллической структуры интеркалята выявил сильных изменений в их строении [1]. Так как пространственная группа матричного кристалла  $\text{Bb}2_1\text{m}$ , а пространственная группа интеркалята характеризуется как  $\text{A}12_1\text{1}$ . А это значит что, удаления пакетов матричного кристалла вдоль оси  $c$ , сопровождается так же их смещением относительно друг друга. В таком случае возникает вопрос, можно ли процесс назвать интеркаляцией ?!

Также, обратимость процесса интеркаляции является одна из основных свойства процесса интеркаляции. Поэтому возникает потребность для изучения процесса термического разложение, определить характер деинтеркаляции полученного интеркалята, и выяснить восстановится ли матричные кристаллы. Термогравиметрический анализ, проведенный при температурном интервале 30-420°C в Q-дериватографе, показал что, при температуре 250-350° С молекулы 4-АП полностью удаляются от интеркалята. С целью изучения структурных изменений интеркалированные кристаллы изучались методом рентгеновской высокотемпературной рентгенографии. Исследования проводились в рентгеновском дифрактометре D8-ADVANCE, при температурном интервале 30-420°C. Из дифрактограм приведенных в рис. 4 видно, что до температуры 250°C интеркалят стабилен. Но при температуре 250°C появляются слабые пики, характеризующие матричные кристаллы. До температуры 420°C интенсивность этих пиков относительно

растет. Однако, пики, характеризующие интеркалированный кристалл, ослабевают, но не исчезают (рис.4).

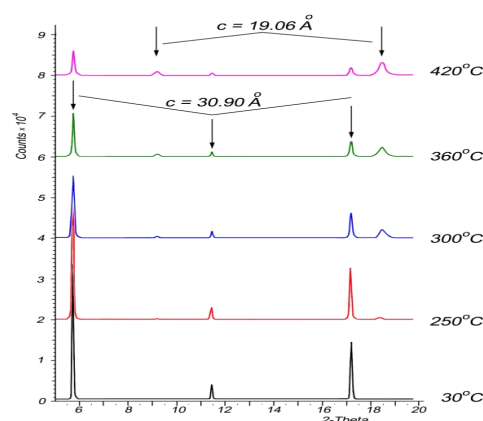
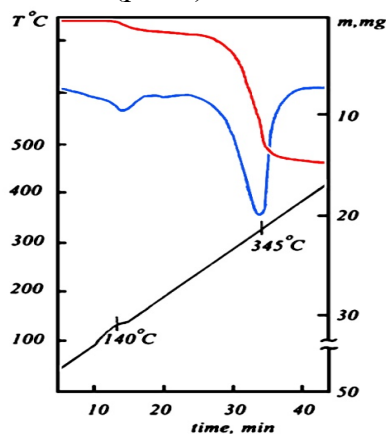


Рис 3. Термические характеристики интеркалята  $\text{GaInS}_3 \cdot 0.5\text{NC}_3\text{H}_4\text{NH}_2$ .  
Рис 4. Рентгеновская дифракция ( $5^\circ < 2\theta < 20^\circ$ ) процесса деинтеркаляции при температурном интервале 30-420°C.

В дифрактограмме, полученной при температуре 420°C, где по термограмме молекулы 4-АП полностью удалились, четко видны пики соответствующие решетке интеркалированного кристалла ( $c = 30.9 \text{ \AA}$ ). Другими словами, кристалл матрица в результате деинтеркаляции восстанавливается частично. С другой стороны цикл интеркаляция-деинтеркаляция показала, что часть использованных кристаллов приобрели первичное состояния, то есть наблюдается обратимость процесса.

### Литература

1. Амирасланов И.Р., Гусейнов Г.Г., Кулиев А.С., Мамедов Х.С. Кристаллическая структура ромбического  $\text{GaInS}_3$ . // Кристаллография, 1987, т. 32, №1, с. 243-244.
2. Imameddin Amiraslanov. Intercalation of the layer semiconductor  $\text{InGaS}_3$  with 4-aminopyridine. International congress on advanced in applied physics and material science. 2011, Antalya, Turkey, conference proceedings, pp.492-496.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТОЛЩИНЫ CIGS НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ CIGS/Si С ПОМОЩЬЮ SCAPS-1D

Тураев Ф.Ш.<sup>1</sup>, Жураев Х.Н.<sup>2</sup>, Тураев З.Г.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ТГТУ имени Ислама Каримова, Ташкент, Узбекистан

<sup>2</sup>ФТИ НПО «Физика-Солнце» АН РУз, Ташкент, Узбекистан

<sup>3</sup>НУУз имени Мирзо Улугбека, Ташкент, Узбекистан

E-mail: farxodjon@bk.ru

CIGS имеет преимущество с точки зрения низкой стоимости и экологически чистого фотоэлектрического материала [1]. На сегодняшний день рекордные показания КПД солнечного элемента CIGS составляют 22,9% [2]. Оценка электрических характеристик и параметров солнечных элементов с помощью симуляционных программ, сравнение и их экспериментальными данным является актуальным.

На основе солнечного элемента CIGS проведено моделирование с помощью программы ESCAPS -1D.[3] Из этого опыта видно, что коэффициент полезного действия составляет 23,26% [4] и результаты симуляционных методов различаются на 10% [5] по сравнению с экспериментальными результатами. Также в литературе имеются результаты моделирования ультратонких солнечных элементов на основе  $\text{ZnO/CdS/CIGS/Si}$ ,

и оценено значительное влияние кремниевых слоев на КПД (от 16,39% до 21,3%) CIGS солнечных элементов [6].

В работе [7], в лабораторных условиях получены экспериментальные результаты для солнечных элементов на основе CIS/Si. Рассмотрена пленки с толщиной от 500 нм до 1000 нм, оптимальная толщина данной плёнки составляла 700 нм где было получено максимальное значение КПД которое составляло 5,6%.

В данной работе исследован солнечный элемент на основе гетероструктур CIGS/ Si с помощью симуляционных методов. Моделирование солнечного элемента проведено с помощью программы SCAPS 3307.

Объектом исследования являлся CIGS/Si. Проведено исследование симуляционным методом с помощью программы SCAPS 3307. Здесь рассматривался тонкоплёночный солнечный элемент с поглощающими слоями на основе многокомпонентных соединений меди типа Cu-In-Ga-(S,Se)/Si (CIGS/Si). Рассмотрены способы приготовления поглощающих слоёв CIGS, исследован химический состав, особенности конструкции и принципы функционирования солнечных элементов на основе CIGS/Si.

Физические параметры солнечного элемента, которые используются при моделировании приведены в таблице 1. [8]

Сделано испытание CIGS с толщиной от 1,2 до 2 мкм, при температуре 310 К и при освещении AM 1,5G. В процессе моделирования толщина подложки Si не менялась и структура CIGS и Si также не изменялась.

Таблица 1. Физические параметры, используемые при моделировании.

Параметры	p-CIGS	n-Si
Ширина запрещенной зоны	1.10	1.12
электронное сродство, $X_c$ (eV)	4.50	4.05
диэлектрическая постоянная $\epsilon_r$	13.60	11.90
плотность состояний в зоне проводимости $N_c$ (cm <sup>-3</sup> )	$2.2 \times 10^{18}$	$2.8 \times 10^{19}$
плотность состояний в валентной зоне $N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	$1.8 \times 10^{19}$	$2.65 \times 10^{19}$
электронная подвижность $\mu_n$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	100	1450
подвижность дырок $\mu_p$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	25	500
электронная и дырочная концентрация n,p (cm <sup>-3</sup> )	$2 \times 10^6$	$1 \times 10^{20}$
Плотность дефектов (cm <sup>-3</sup> )	$1 \times 10^{14}$	$1 \times 10^{14}$

На рисунке 1 приведена зависимость толщины от напряжения холостого хода. Как видно из рисунка с увеличением толщины пленок CIGS напряжения холостого хода уменьшается.

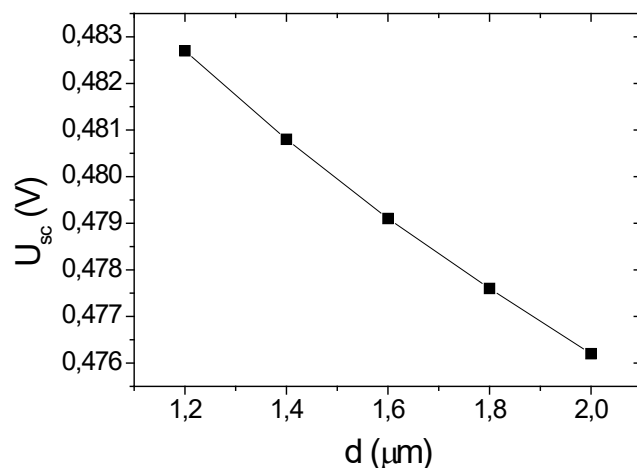


Рис.1. Зависимость изменения толщины пленки CIGS от напряжения холостого хода.

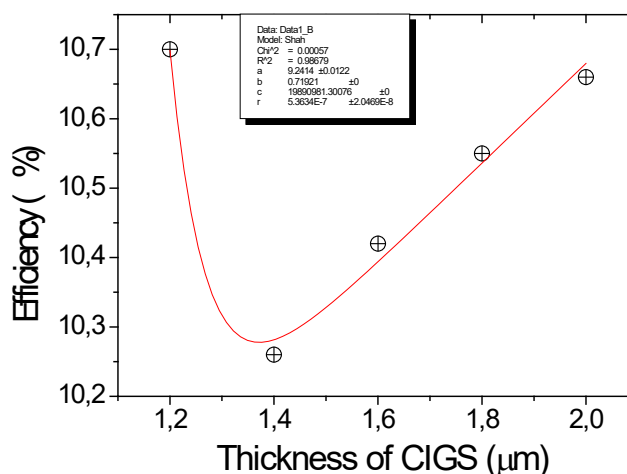


Рис.2. Зависимость изменения толщины пленки CIGS от КПД солнечного элемента.

На рисунке 2, показана зависимость изменения толщины пленки CIGS от коэффициент полезного действия солнечного элемента. В процессе симуляции наблюдалась с увеличением толщины до 1,4 мкм пленок CIGS наблюдалась уменьшение КПД CIGS/Si от 10,7% до 10,26%, затем с увеличением толщины с 1,4 мкм до 2 мкм наблюдалась повышение эффективности солнечного элемента.

Таким образом, исследована CIGS/Si структура симуляционным методом помощью программы SCAPS 3307. При толщине пленки 1,2 мкм наблюдался самый высокий КПД солнечного элемента 10,7%. При увеличении толщины пленки наблюдался спад КПД до 10,26%, и далее увеличение КПД до 10,66%.

Показано, что изменением толщины пленок CIGS от 1,2 до 2,0 мкм КПД солнечного элемента увеличивается.

### Литература

- Новиков Г.Ф., Гапанович М.В., Солнечные преобразователи третьего поколения на основе Cu-In-Ga-(S, Se), УФН 187 173–191 (2017), DOI: 10.3367/UFNe.2016.06.0378271.
- Yoshida, S. Solar Frontier achieves world record thin-film solar cell efficiency of 22.9%. Solar Frontier [http://www.solar-frontier.com/eng/news/2017/1220\\_press.html](http://www.solar-frontier.com/eng/news/2017/1220_press.html) (2017).
- C.H.Oon, K.W.Ng, CIGS Photovoltaics For The Urban Tropics, Energy Procedia, 143, 733-738 (2017), <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.12.754>
- A.K. Daoudia, Y. El Hassouani, A. Benami. Investigation of the effect of thickness, band gap and temperature on the efficiency of CIGS solar cells through SCAPS-1D. International Journal of Engineering and Technical Research (IJETR) 6, (2), 71-75 (2016).
- Kong Fai Tai, Rui Kamada, Takeshi Yagioka, Takuya Kato, and Hiroki Sugimoto, From 20.9 to 22.3% Cu(In,Ga)(S,Se)<sub>2</sub> solar cell: Reduced recombination rate at the heterojunction and the depletion region due to K-treatment. Jpn. J. Appl. Phys. 56, 08MC03 (2017) <https://doi.org/10.7567/JJAP.56.08MC03>
- H. Heriche, Z. Rouabah, N. Bouarissa, New ultra thin CIGS structure solar cells using SCAPS simulation program, International Journal of Hydrogen Energy, 42 (15), 9524-9532 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.02.099>
- Iman H.Khudayer Study of Physical and Optoelectronic Properties of CuInSe<sub>2</sub>/Si Heterojunction Solar Cells 119, 2017, 507-517 <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.07.062>
- Klaus Zimmer; Xi Wang; Pierre Lorenz; Lukas Bayer; Martin Ehrhardt; Christian Scheit; Alexander Braun, In-process evaluation of electrical properties of CIGS solar cells scribed with laser pulses of different pulse lengths, Physics Procedia, 56, 1024-1033 (2014). <http://doi.org/10.1016/j.phpro.2014.08.014>

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ  
ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНОЙ СИСТЕМЫ В  
ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ Si/SiGe/Si С ДВУМЯ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ

Акмаев М.А.

МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

E-mail: mark.akmaev@yandex.ru

В последние годы проявляется повышенный интерес к исследованиям электронно-дырочных бислоев, в которых неравновесные электроны и дырки находятся в различных пространственно разделенных квазидвумерных слоях полупроводниковой гетероструктуры. Электроны и дырки в бислоях могут связываться в пространственно неяркие (дипольные) экситоны. Экспериментально такие бислои были реализованы в гетеросистемах GaAs/AlGaAs I рода с двойными или широкими квантовыми ямами (КЯ) при приложении к структуре электрического поля, перпендикулярного ее плоскости. В таких структурах с бислоями была обнаружена бозе-эйнштейновская конденсация дипольных экситонов [1].

В настоящей работе методом стационарной фотолюминесценции (ФЛ) при гелиевых температурах исследована структура (*buffer* Si<sub>1-y</sub>Ge<sub>y</sub>)/*t*Si/*s*Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/*t*Si/(*cap* Si<sub>1-y</sub>Ge<sub>y</sub>) II рода ( $x > y$ ), выращенная методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложке из сплава твердого раствора Si<sub>1-y</sub>Ge<sub>y</sub>. Две КЯ для электронов образованы в напряженных (растянутых) слоях *t*Si с толщинами  $d = 4$  нм. Слои *t*Si разделены напряженным (сжатым) слоем твердого раствора *s*Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> (барьер для электронов и КЯ для дырок,  $d = 4$  нм.). Образец со структурой представлял собой плоскопараллельную пластину с полированными гранями размерами 15x7x0.4 мм. ФЛ дипольной электронно-дырочной системы в данной структуре была исследована в [2]. Основная цель данной работы – исследовать пространственное распределение интенсивности и спектрального состава ФЛ системы по плоскости образца со структурой.

При низких температурах и высоких уровнях накачки в данной структуре наблюдается образование квазидвумерной дипольной электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ). Нами была изучена ФЛ дипольных экситонов и ЭДЖ при регистрации ФЛ как из области возбуждения, так и из боковых граней образца. Показано, что люминесценция дипольной ЭДЖ (QW: dip EHL-TO) появляется на боковых гранях в результате распространения света в образце от места возбуждения.

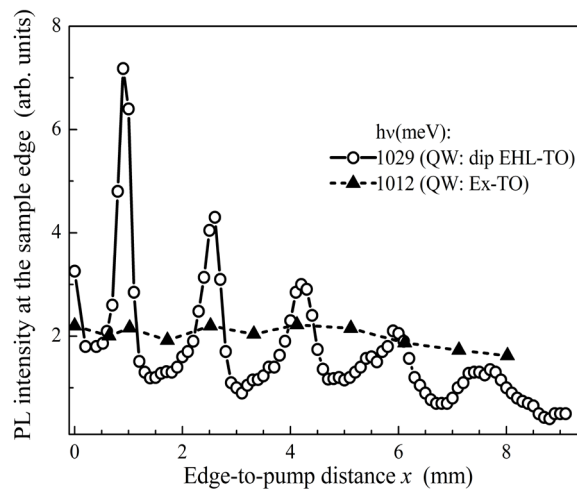


Рис. 1. Зависимость интенсивности ФЛ линий дипольной ЭДЖ (QW: dip EHL-TO) и линии экситонов в длинноволновой области спектра (QW: Ex-TO) на краю структуры от расстояния между краем структуры и точкой возбуждения ( $T = 2$  К,  $P = 100$  Вт/см<sup>2</sup>).

Причем, обнаружено, что при изменении расстояния от места возбуждения до края образца, интенсивность линий излучения, выходящего с торцевой грани, осциллирует с периодом, отвечающим толщине образца (рис. 1). Осцилляции излучения, выходящего из торцевой грани тонкой пластины, регистрируются в ограниченную апертуру, при изменении расстояния от грани точечного источника света внутри пластины, и могут быть объяснены при учете угла полного внутреннего отражения. Это означает, что размеры источника люминесценции дипольной ЭДЖ малы.

В то же время, интенсивность длинноволновой компоненты спектра ФЛ (узкая линия, связанная, предположительно, с экситонами (QW: Ex)) практически монотонно медленно уменьшается при увеличении этого расстояния (рис. 1). Что возможно при протяженных по структуре ( $\sim 1$  см) размерах источника излучения.

Непосредственные измерения пространственного распределения ФЛ посредством изменения положения области наблюдения относительно места возбуждения (рис. 2) показали, что размеры пятна люминесценции, отвечающего длинноволновой компоненте спектра ФЛ ( $> 1$  см), значительно превышают размеры области люминесценции дипольных экситонов и ЭДЖ ( $< 0.5$  мм при острой фокусировке возбуждающего излучения). К тому же бесфонная компонента экситонов больше по интенсивности, чем фонная. Данные результаты можно объяснить, предположив наличие актов переизлучения бесфонной экситонной линии.

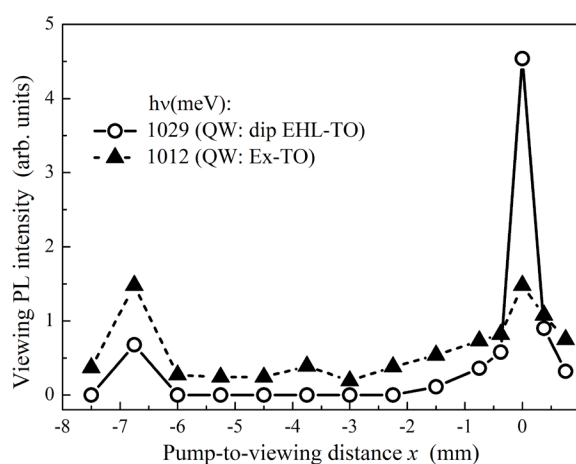


Рис. 2. Зависимость интенсивности ФЛ линий дипольной ЭДЖ (QW: dip EHL-TO) и линии экситонов в длинноволновой области спектра (QW: Ex-TO) от расстояния между точкой возбуждения и местом наблюдения ФЛ ( $T = 2$  К,  $P = 100$  Вт/см<sup>2</sup>).

Таким образом, мы наблюдаем две системы неравновесных носителей с различной пространственной локализацией: (точечная, отвечающая дипольной системе, и протяженная в плоскости структуры).

Структуры выращены Новиковым А.В. и Лобановым Д.Н. в Институте физики микроструктур РАН (Нижний Новгород). Автор выражает благодарности сотрудникам ФИАН Цветкову В.А. и Сибельдину Н.Н. за помощь в работе, конструктивные советы и обсуждения результатов.

Работа поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» №18-2-6-97-1, грантом РФФИ №16-29-03352 офи\_м и Программами РАН.

### Литература

1. Тимофеев В.Б. Коллективные экситонные явления в пространственно разделенных электрон-дырочных слоях в полупроводниках// УФН. 2005. Т. 175. С. 315.
2. Akmaev M.A., Burbaev T.M. Dipolar electron-hole liquid in a double-well SiGe/Si heterosystem. // Journal of Physics: Conf. Series. 2017. V 816, P. 012016.



ИССЛЕДОВАНИЕ СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ОБРАЗЦОВ ИЗ СТАЛЕЙ  
МЕТОДАМИ РАДИОГРАФИЧЕСКОГО И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКОГО  
НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ

Алвахеба А.И.<sup>1</sup>, Бекетов В.Г.<sup>2</sup>, Гальчин А.В.<sup>1</sup>,  
Иванов О.В.<sup>3</sup>, Иванова Т.Е.<sup>3</sup>, Сурин В.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия

<sup>2</sup>ВИТИ НИЯУ МИФИ, Волгодонск, Россия

<sup>3</sup>ООО «Техноскан», Волгодонск, Россия

E-mail: visconst@rambler.ru<sup>1</sup>, VGBeketov@mephi.ru<sup>2</sup>, tehnoskan@mail.ru<sup>3</sup>

Приведены результаты комплексного исследования специально приготовленных контрольных сварных соединений (КСС) методами радиографического и электрофизического контроля. При измерениях использовалась мобильная информационно-измерительная система, размещенная на ноутбуке Asus X554L, разработанная в лаборатории EphysLAB НИЯУ МИФИ.

Радиографическое исследование КСС выполнено в испытательной лаборатории ООО «Техноскан» (г. Волгодонск) по методике контроля ПНАЭ Г-7-017-89 на оборудовании РАПАН М 200/100.

В сварные соединения искусственно введены структурные неоднородности, классифицируемые как несплавление корня шва, непровар корня шва, несплавление по разделке шва, скопление пор, отдельные крупные поры и другие. Главной поставленной задачей было сравнение результатов неразрушающего контроля, полученных методами радиографии и сканирующей контактной потенциометрии.

Проводились также испытания модельных образцов под нагрузкой (с использованием универсальной испытательной машины Р-10М-авто и гидравлического испытательного пресса ИП-500М-авто) и без нагрузки при комнатной температуре. Образцы были изготовлены из сталей марок сталь 20, СтЗсп, 09Г2С и 12Х18Н10Т.

### Литература

1. Сурин В.И., Оборин С.Б. Обнаружение усталостных повреждений при многоцикловых испытаниях материалов // Динамика систем, механизмов и машин: Материалы VI Международной научно-технической конференции. Омск: ОмГТУ. 2007. Кн.1. С. 345-348.
2. Сурин В.И., Занько В.И., Бирюков А.П. Диагностика образования и роста усталостных трещин в тонких металлических пластинах // Информационные технологии в проектировании и производстве. 2013. № 3. С. 71-77.
3. Сурин В.И., Шульга А.В., Востренков Ю.Ю., Кокряков Р.А. Применение метода сканирующей контактной потенциометрии при механических испытаниях материалов на растяжение // Научно-технический журнал «Информационные технологии в проектировании и производстве» М.: ФГУП ВИМИ, выпуск № 2, 2015г., с.24-31.

### ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ В СПЛАВАХ СИСТЕМЫ $(Tb_{1-x}Y_x)_{0,8}Sm_{0,2}Fe_2$

Алероева Т.А., Алероев А.А

Чеченский государственный университет, Грозный, Россия

E-mail: tamila\_hinata.ru@mail.ru

Нами впервые синтезирована многокомпонентная система  $(Tb_{1-x}Y_x)_{0,8}Sm_{0,2}Fe_2$ , предложенная профессором Илюшиным А.С., как система с конкурирующими обменными взаимодействиями. Параметр замещения в данной системе  $x = 0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1,0$ . Образцы получены методом дуговой плавки в атмосфере спектрально чистого ар-

гона при нормальном давлении. Данная система интересна тем, что в ней присутствуют два типа межподрешеточных обменных взаимодействий Tb-Fe и Sm-Fe. Данные взаимодействия противоположного знака. Поэтому тип магнитного упорядочения в сплавах данной системы и весь спектр их магнитных свойств, включая и магнитострикционные, будут определяться знаком и величиной доминирующего взаимодействия R-Fe.

В работах [1,2,3] представлены фазовый состав сплавов системы, их атомно-структурные характеристики и поведение основных магнитных и магнитострикционных характеристик. С магнитострикционным эффектом тесно связаны и аномалии теплового расширения в редкоземельных интерметаллидах. Это объясняется тем, что магнитострикционные деформации, вызываемые обменными силами в решетке, проявляются не только в магнитном поле, но также при нагревании их в отсутствие поля. Наложение этих изменений объема на обычное тепловое расширение приводит в редкоземельных интерметаллидах к некоторым особенностям теплового расширения  $\Delta l/l_0$  в зависимости от температуры или параметра замещения  $x$ . Если названные деформации отрицательны, то они могут скомпенсировать или полностью перекрыть эффект теплового расширения.

Именно это явление наблюдается в исследованных нами сплавах системы  $(Tb_{1-x}Y_x)_{0,8}Sm_{0,2}Fe_2$ . Исследования теплового расширения нами проведено в температурном интервале от 84 до 300 К. Полученные результаты представлены на рисунке 1.

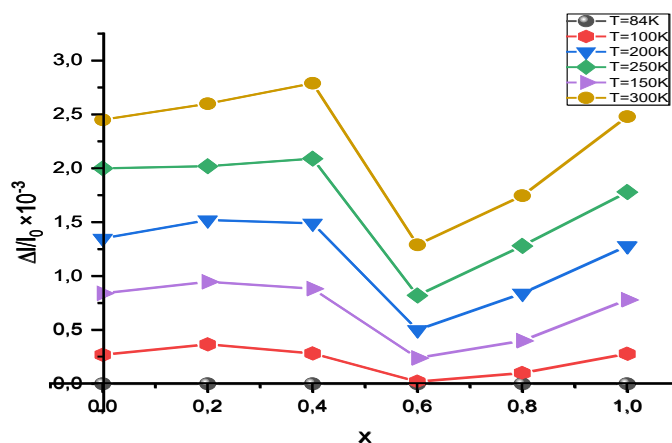


Рис. 1. Зависимость теплового расширения сплавов системы  $(Tb_{1-x}Y_x)_{0,8}Sm_{0,2}Fe_2$  от параметра замещения  $x$ .

Видно, что тепловое расширение всех сплавов системы в области азотных температур практически равно нулю. Кроме того, в области значений параметра замещения  $x = 0,6$  на всех кривых  $\Delta l/l_0(x)$  наблюдается ярко выраженный минимум. Вычисления показывают, что данный сплав  $(Tb_{0,4}Y_{0,6})_{0,8}Sm_{0,2}Fe_2$  ( $x = 0,6$ ) обладает наименьшим коэффициентом теплового расширения среди сплавов данной системы, приблизительно равным  $\alpha = 5 \cdot 10^{-6}$ . При данной концентрации иттрия происходит практически полная взаимная компенсация магнитных моментов редкоземельной и магнитной подрешеток [2]. Конкуренция между обменными взаимодействиями Tb-Fe и Sm-Fe и влияние спонтанной магнитострикции, которая также противоположного знака в исходных соединениях  $TbFe_2$  и  $SmFe_2$ , и приводит к наблюдаемым эффектам.

### Литература

1. Алероева Т.А. Магнитострикция в многокомпонентных сплавах редкоземельных интерметаллидах  $(Tb_{1-x}Y_x)_{0,8}Sm_{0,2}Fe_2$  с конкурирующими обменными взаимодействиями. Ломоносовские чтения. Москва, МГУ. - 2018.
2. Umkhaeva Z.S., Ilyushin A.S., Aleroeva T.A., Tereshina I.S., Pankratov N.U. Yttrium influence in exchange interactions in Laves phases  $(Tb_{1-x}Y_x)_{0,8}Sm_{0,2}Fe_2$ . AER-Advances in Engineering Research. - 2018. - V.177. - P. 198-202.

3. Plyushin A., Rusakov V., Umhaeva Z., Aleroeva T., Kiseleva T. The Competing Hyperfine Interactions in (TbY)SmFe<sub>2</sub> Intermetallic Compounds. The 21st International Conference on Solid Compounds of Transition Elements. – Vienna, 2018. – P. 34.

### ДИНАМИКА ПАРАМАГНИТНЫХ ЦЕНТРОВ В НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ TiO<sub>2</sub>/MoO<sub>3</sub>/V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>

Аллахвердиев М.А.

МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва Россия

E-mail: wintermonth1@gmail.com

Диоксид титана (TiO<sub>2</sub>) применяется в различных областях науки и техники. Так, после установления его высокой фотокаталитической активности, перспективно его применение в качестве материала для создания фильтров для очистки окружающей среды. [1,2]. Диоксид титана участвует в реакциях разложения органических соединений и обладает способностью окислять токсичные газы.

TiO<sub>2</sub> является широкозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны  $E_g \approx 3,2$  эВ. Для генерации электрон-дырочных пар необходимо ультрафиолетовое излучение, что ограничивает использование солнечного света в устройствах с TiO<sub>2</sub>. Для уменьшения ширины запрещенной зоны диоксид титана легируют различными примесями [3,4]. Такого рода модификация открывает возможности использования большей части солнечного спектра для фотокатализа в диоксиде титана.

Из литературы известно, что образцы нанокристаллического TiO<sub>2</sub> в составе гетероструктур, перспективны для фотокатализа [5]. В данной работе проведено изучение влияния освещения на парамагнитные центры в образцах TiO<sub>2</sub>/MoO<sub>3</sub>/V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>.

Исследование проводилось на ЭПР-спектрометре BRUKER ELEXSYS 500 (рабочая частота 9,5 ГГц - X-диапазон, чувствительность  $5 \times 10^{10}$  спин/Гс) при температуре 300 и 77 К. Освещение образцов осуществляли с помощью ртутной лампы BRUKER ELEXSYS ER 202 UV (мощность 50 Вт).

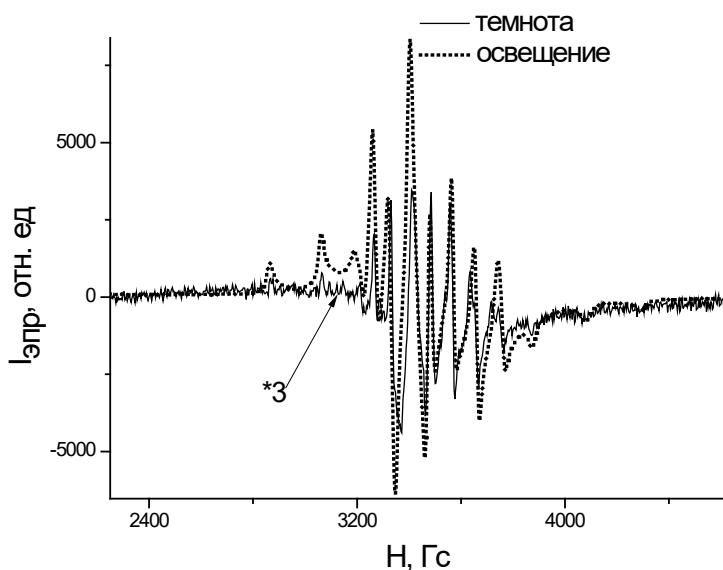


Рис.1 Влияние освещения на интенсивность сигнала ЭПР образцов TiO<sub>2</sub>/MoO<sub>3</sub>/V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Темновой спектр ЭПР умножен на 3 для улучшения визуализации. T=300 К.

Нанокристаллический TiO<sub>2</sub> в виде водного коллоида был получен методом контролируемого гидролиза в условиях медленного титрования водного раствора 2.5 М TiCl<sub>4</sub>

+ 0.65 M HCl, охлажденного до 0° C, раствором NH<sub>4</sub>OH (12.5% ) при интенсивном перемешивании. Для получения TiO<sub>2</sub>/MoO<sub>3</sub>/V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> В коллоидный раствор TiO<sub>2</sub> вводили расчетное количество смеси (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>MoO<sub>3</sub>+NH<sub>4</sub>VO<sub>3</sub>. Полученные образцы TiO<sub>2</sub>/MoO<sub>3</sub>/V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> подвергались термообработке при 400 °C в течение 1.5 ч на воздухе. Площадь удельной поверхности образцов составляла 110 м<sup>2</sup>/г.

На рис. 1 представлен спектры ЭПР исследуемых образцов в темноте и при освещении. Для определения природы парамагнитных центров и их основных параметров было выполнено компьютерное моделирование экспериментальных спектров ЭПР в программе «SIMFONIA». Были получены следующие значения параметров спектра ЭПР:  $g_{\perp} = 1.995$ ,  $g_{\parallel} = 1.951$ ,  $A_{\perp} = 55$  Гс,  $A_{\parallel} = 155$  Гс,  $\Delta H_{\perp} = 29$  Гс,  $\Delta H_{\parallel} = 17$  Гс. Согласно литературным источникам [4] анизотропный сигнал ЭПР с указанными параметрами может быть приписан парамагнитным центрам (ПЦ), которые представляют собой ионы ванадия V<sup>4+</sup> с нескомпенсированным электронным спином и парамагнитным ядром (спин ядра 7/2). Было исследовано влияние освещения на интенсивность сигнала ЭПР. Обнаружено, что при освещении новых парамагнитных центров не образуется, а интенсивность сигнала ЭПР увеличивается примерно в 7 раз (Рис.1). Вариации интенсивности сигнала ЭПР можно объяснить, предположив, что в исследуемых образцах происходит фотоиндуцированная реакция перезарядки ПЦ: образец+hν → h<sup>+</sup>+e<sup>-</sup>, V<sup>5+</sup>+e<sup>-</sup> → V<sup>4+</sup>. В результате количество парамагнитных центров увеличивается. После выключения освещения интенсивность сигнала ЭПР возвращается в исходное состояние в течение примерно 12 часов. Такой долговременной, но обратимый характер можно объяснить, предположив, что генерация носителей заряда происходит в TiO<sub>2</sub>, далее электроны инжектируются в MoO<sub>3</sub> и V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Таким образом, носители заряда оказываются пространственно разделены, и их рекомбинация оказывается подавлена.

Обнаруженный эффект накопления заряда свидетельствует о перспективности полученных структур для применения в области фотокатализа

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-29-23051 мк).

### Литература

1. Kokorin A. I., Poznyak S. K., Kulak A. I. // *Electroanalytical chemistry* 1998, 442 (2), 99.
2. D.F. Ollis, H. Al-Ekabi. (Eds.): *Photocatalytic Purification and Treatment of Water and Air* // Amsterdam: Elsevier . Elsevier, Amsterdam (1993).
3. Tarasov, A.; Minnekhanov, A.; Trusov, G.; Konstantinova, E.; Zyubin, A.; Zyubina, T.; Sadovnikov, A.; Dobrovolsky, Yu.; Goodilin, E. *Shedding Light on Aging of N-Doped Titania Photocatalysts.* // *J. Phys. Chem. C* 2015, 119, 18663–18670.
4. Kokorin, A. I. In *Chemical physics of nanostructured semiconductors*; Kokorin, A. I., Bahnemann, D.W., Eds.; VSP–Brill Acad. Publ.: Utrecht, Boston, 2003; pp 203–263.
5. Свиридова Т. В., Садовская Л. Ю., Кокорин А. И., Константинова Е.А., Свиридов Д. В., Фотоаккумулирующие пленочные системы на основе наногетероструктур TiO<sub>2</sub>/MoO<sub>3</sub> и TiO<sub>2</sub>/ MoO<sub>3</sub>:V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. // *Химическая физика* 2017, 36, №4, с.1-6.

### СПЕКТРАЛЬНЫЙ ИК АНАЛИЗ ТОНКИХ ПЛЕНОК ФУЛЛЕРЕНА

Арутинов Н.Э., Гурченко В. С.

КФУ имени В.И. Вернадского, Симферополь, Россия

E-mail: kintiri1997@gmail.com

Современные устройства создаются и разрабатываются на основе тонких пленок. Среди таких структур особый интерес вызывают органические и углеродсодержащие структуры, в частности, фуллерены и фуллеренсодержащие материалы (ФСМ), которым и посвящены данные научные исследования.

Существует большое количество методов получения фуллеренов. Для синтеза пленок нами применялись фуллерены, полученные методом распыления графита [1]. ФСМ использовались в качестве примеси, полученные методом низкотемпературного Крекинга [2]. Образцы представляют собой стеклянные подложки, на которые нанесена пленка методом осаждения из взвеси фуллерена в дихлорметане, хлороформе, четыреххлористом углероде, бензоле и толуоле, что в свою очередь позволило использовать полученные образцы для измерения ИК-спектров и определения качественного и количественного состава полученных пленок.

Полученные данные позволяют подтвердить наличие в пленке как фуллерена, так и растворителя, которые формируют комплексы, обладающие новыми свойствами. Обнаружено, что значительное поглощение ИК излучения наблюдалось у образцов, полученных из растворов хлорпроизводных метана, при исследовании которых было отмечено формирование кристаллов сложных геометрических форм. Также стоит отметить высокое поглощение образца, полученного из раствора в хлороформе, так как в нем пик, соответствующий характеристической частоте фуллерена, имеет наибольшую интенсивность. Помимо этого, в силу особенностей метода измерения имеется возможность оценки толщины пленки в точке снятия спектра.

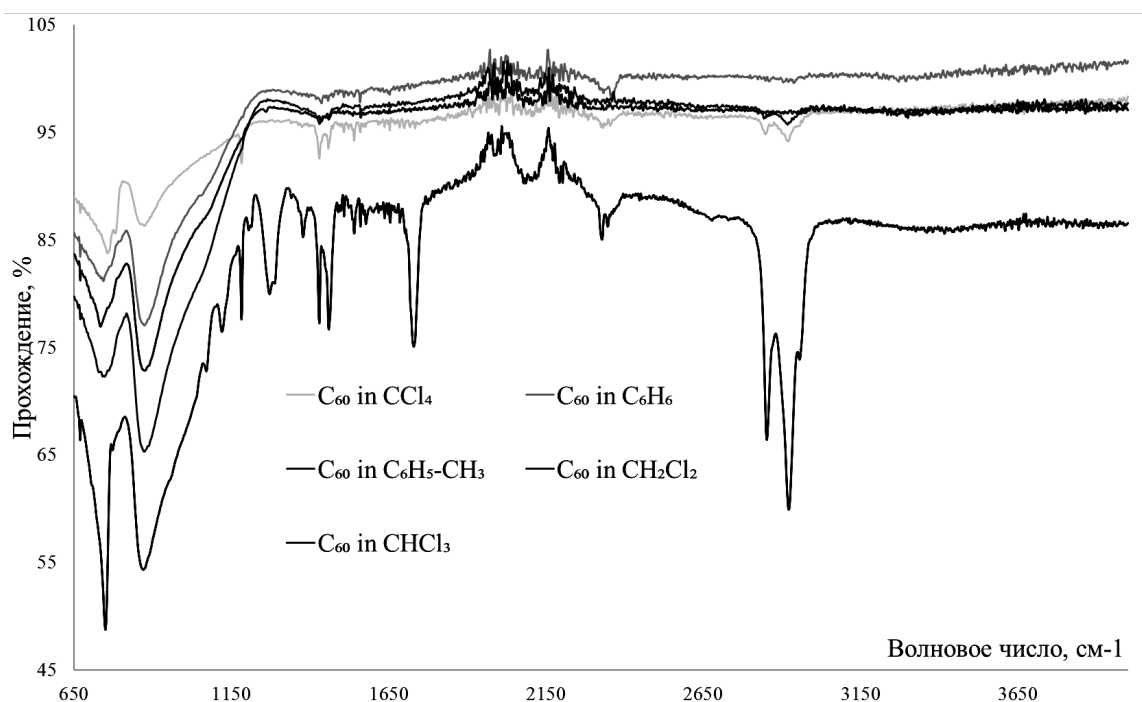


Рис.1. ИК-спектрограмма тонких пленок  $C_{60}$  полученных из 1мл растворов.

В результате проведения эксперимента были сделаны выводы о качественном и количественном составе полученных пленок, их толщине, получена информация об особенностях растворения  $C_{60}$  в вышеперечисленных растворителях.

### Литература

1. Haufler R. E. Efficient production of  $C_{60}$  (buckminsterfullerene),  $C_{60}H_{36}$ , and the solvated buckide ion / R. E. Haufler, J. Conceicao, L. P. F. Chibante, Y. Chai // *J. Phys. Chem.* – 1990. – V. 94. – P. 8634 - 8636.
2. Работагов К. В. Исследование структуры и физико-химических свойств пористых углеродных материалов, полученных низкотемпературным Крекингом / К. В. Работагов, Е. В. Сай, Е. М. Максимова, И. А. Наухацкий, Н. И. Карпенко, А. И. Шевченко, А. С. Мазинов // *Ученые записки Крымского федерального университета им. В. И. Вернадского Серия «Биология, химия».* – 2015. – Т. 1, Вып. 67. – С. 125 - 131.

ИССЛЕДОВАНИЯ МОНЕТ СРЕДНЕВЕКОВОЙ ВОЛЖСКОЙ БОЛГАРИИ  
МЕТОДАМИ НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ И ТОМОГРАФИИ

Бакиров Б.А.<sup>1,2</sup>, Кичанов С.Е.<sup>2</sup>, Козленко Д.П.<sup>2</sup>,  
Белушкин А.В.<sup>1,2,3</sup>, Храменкова Р.Х.<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup> КФУ, Казань, Россия

<sup>2</sup> ОИЯИ, ЛНФ имени И.М. Франка, Дубна, Россия

<sup>3</sup> Дубненский государственный университет, Дубна, Россия

<sup>4</sup> Институт археологии им. А.Х. Халикова АН РТ, Казань, Россия

E-mail: bulatbakirov4795@gmail.com

Исследования физико-химических свойств древних монет являются одним из важных направлений в неразрушающем контроле объектов культурного наследия. Нумизматический материал хранит в себе ценную информацию о торгово-экономическом и социальном развитии древних цивилизаций и государств. Известно, что изучение химического состава и внутренней структуры монет может дать важную информацию о месторождениях серебряной или золотой руды, из которой изготовлены монеты, соответствие определенному историческому периоду или особенностям чеканки, выявлению подделок.

По сравнению с применяющимися в археологических научных сообществах методами рентгенофлуоресцентного анализа, электронной микроскопии и металлографии, нейтронные методы исследования обладают высокой проникающей способностью в толщу металлических объектов. Так как из-за особенностей литья и чеканки средневековых серебряных монет для них характерно неравномерное распределение химических компонентов по всему объему, применение методов нейтронной дифракции, радиографии и томографии является оправданным.

В качестве объектов исследования были выбраны две монеты с территории Волжской Болгарии: мультидирхем саманидов (Рис. 1а), датируемый X веком, и дирхем эмира Булат-Тимура (Рис. 2а), правившего в конце XIV века, относящиеся к двум наиболее активным периодам развития товарно-денежных отношений в регионе и максимального распространения в торговых операциях металлических монет. Исследования кристаллической структуры и фазового состава монет проводились с помощью метода нейтронной дифракции на специализированном дифрактометре для исследования микрообразцов ДН-6 на высокопоточном реакторе ИБР-2. Анализ дифракционных данных производился методом Ритвельда с помощью программы FullProf. Пространственное распределение химических элементов в монетах исследовалось методом нейтронной радиографии и томографии на специализированной экспериментальной станции на 14-ом канале импульсного высокопоточного реактора ИБР-2. Из-за различной степени ослабления интенсивности нейтронного пучка при прохождении через компоненты разного химического состава возможно получить информацию о распределении фаз внутри объема исследуемого материала с пространственным разрешением на микронном уровне.

В результате работы установлено, что обе исследованных монеты состоят из медно-серебряного сплава. Однако, для мультидирхема характерно очень высокое содержание меди – в среднем около 50 % от общего объема материала монеты. Пространственное распределение серебра и меди в этой монете неоднородно (Рис. 1б), что может быть связано как с особенностями исходной руды, так и с процессами при чеканке монеты. Дирхем практически полностью состоит из серебра. Объемное содержание меди в этой исследуемой монете крайне низкое – 5.2 %. Нейтронные данные указывают на равномерное распределение серебра в материале монеты (Рис. 2б). Это может свидетельствовать о повышении качества исходного металла и изменении технологий.

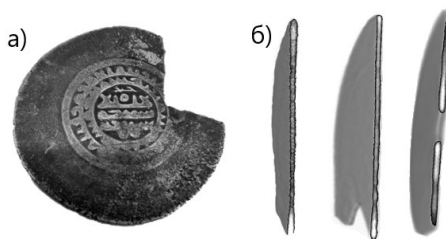


Рис. 1. Фотография мультидирхема саманидов (а) и продольные виртуальные срезы восстановленной трехмерной модели исследуемой монеты (б), соответствующие различным участкам монеты. Более светлые участки соответствуют максимальному коэффициенту ослабления нейтронного пучка или областям с высокой концентрацией серебра. Более темные области характеризуют низкое сечение полного поглощения нейтронов, что соответствует областям с высоким содержанием меди.

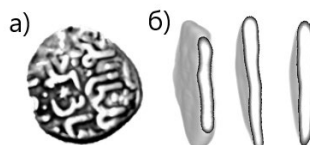


Рис. 2. Фотография дирхема эмира Булат-Тимура (а) и продольные виртуальные срезы восстановленной трехмерной модели исследуемой монеты (б), соответствующие различным участкам монеты. Распределение серебряной и медной фаз по объему монеты является однородным.

## ОСОБЕННОСТИ ДИФРАКЦИИ КРУГОПОЛЯРИЗОВАННОГО СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ

Баконин Р.Д.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: r.bakonin@gmail.ru*

Поляризационные явления характерны для взаимодействия электромагнитного излучения с кристаллами в различных энергетических диапазонах, в том числе и в рентгеновской области. Они являются результатом искажения электронных состояний кристаллическим полем или магнитными взаимодействиями атомов и проявляются, в особенности, при энергиях падающего излучения близких к краям поглощения атомов вещества. Методы, основанные на линейном и круговом рентгеновском дихроизме, т.е. различии коэффициентов поглощения волн двух ортогональных поляризаций, в основном, реализуются в геометрии пропускания. В этом случае мы получаем информацию, усредненную по элементарной ячейке кристалла [1]. Геометрия дифракции более чувствительна к локальным свойствам рассеивающих центров благодаря наличию сдвига фаз из-за различия положения атомов в элементарной ячейке. В частности, это приводит к появлению «запрещенных» отражений при энергиях падающего излучения, близких к краям поглощения [2]. Линейный дихроизм в геометрии дифракции присутствует всегда, а круговой до сих пор наблюдался в кристаллах, пространственная симметрия которых включает винтовые оси [3]. В немагнитных кристаллах в геометрии пропускания круговой естественных дихроизм изучается в методе XNCD и существует благодаря переходам типа  $E1E2$  и присутствию в веществе электронных состояний смешанной четности.

В настоящей работе рассматривается возможность различия интенсивности брэгговских отражений для двух круговых поляризаций падающего излучения в нецентросимметричных кристаллах, не обладающих винтовой осью. Показано, что, в отличие от геометрии пропускания, круговой дихроизм (разность интенсивностей отражения волн двух круговых поляризаций) в геометрии дифракции может быть обусловлен переходами типа  $E1E1$ . Для примера рассмотрен круговой дихроизм «запрещенных» отражений типа  $00l$ ,  $l=4n+2$  и  $hh0$ ,  $h=2n+1$  в группе симметрии  $I4_2d$ . Показано, что переходы

типа E1E1 приводят к появлению кругового дихроизма в отражениях  $hh0$ ,  $h=2n+1$ , но в отражениях типа  $00l$ ,  $l=4n+2$  он возможен только для переходов высших порядков мультипольности. Получено выражение, описывающее азимутальную зависимость кругового дихроизма отражений  $hh0$ ,  $h=2n+1$ . Результаты расчетов хорошо описывают экспериментальные данные, полученные на станции ID12 синхротрона ESRF для кристалла  $\text{CuV}_2\text{O}_4$  с симметрией  $I42d$  при энергии падающего излучения, близкой к К-краю поглощения меди.

### Литература

1. Овчинникова Е.Н., Андреева М.А., Дмитриенко В.Е., Синхротронные исследования в физике твердого тела Часть 2, Москва 2009.
2. V. E. Dmitrienko, K. Ishida, A. Kirfel, E.N. Ovchinnikova// Acta Cryst. 2005, A61, p.481–493.
3. Y.Tanaka, T.Takeuchi, S.W.Lovesey, et al.// Phys. Rev. Lett. 100, 2008 P.145502.

### СООТНОШЕНИЕ АМОРФНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФАЗ В ПЛЕНКАХ SIPOS С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КИСЛОРОДА ПО ДАННЫМ РАМАН-СПЕКТРОСКОПИИ

Барков К.А., Голощاپов Д.Л., Ивков С.А.

*ВГУ, Воронеж, Россия*  
*E-mail: barkov@phys.vsu.ru*

Использование пленок полуизолирующего кремния, легированного кислородом, типа SIPOS (Semi-Insulating Polycrystalline Oxygen-doped Silicon) в качестве пассивирующих покрытий полупроводниковых приборов и ИС позволяет повысить пробивные напряжения высоковольтных приборов, так как в них отсутствует, характерный для пленок  $\text{SiO}_2$ , эффект захвата носителей заряда, образующихся в процессе лавинного пробоя [1]. Однако имеющаяся информация о фазовом составе пленок SIPOS противоречива, т.к. данные пленки представляют собой сложный композитный материал, содержащий большое количество аморфных фаз кремния и субоксидов кремния [2], относительное содержание которых оценить достаточно трудно стандартными методами, кроме того многие методики сопровождаются разрушением образца. Отсутствие надежных и простых методов диагностики состава пленок SIPOS затрудняют их применение в промышленных условиях. Поэтому в данной работе определяли возможность использования Раман-спектроскопии для оценки соотношения аморфных и нанокристаллических фаз кремния в пленках SIPOS.

Исследуемые пленки были получены методом химического осаждения из газовой фазы моносилана  $\text{SiH}_4$  с добавлением закиси азота  $\text{N}_2\text{O}$  при пониженном давлении ( $P=0.15$  мм.рт.ст.) и температуре  $635$  °С. В процессе формирования пленок соотношение объемного потока закиси азота к потоку моносилана  $\gamma=\text{N}_2\text{O}/\text{SiH}_4$  варьировалось от 0 до 0.15. Толщина полученных слоев SIPOS составляла  $\sim 300$  нм [2]. Фазовый состав пленок SIPOS определялся стандартными методами рентгеновской дифракции, а также методом ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС), который позволяет устанавливать наличие и соотношение аморфных фаз  $a\text{-Si}$  и  $a\text{-SiO}_x$ , а также кристаллического  $c\text{-Si}$  [3]. Несмотря на высокую информативность спектров УМРЭС в области кремния и эффективность в определении состава многофазных систем, данная методика не подходит для производственных условий, поскольку для регистрации спектров требуется сложное экспериментальное оборудование (спектрометр РСМ-500) и высокий вакуум ( $\sim 10^{-6}$  мм.рт.ст.). В комбинации с перечисленными методами получа-



ли Рамановские спектры на спектрометре Raman Microscope RamMics M532 EnSpectr в области  $360\text{-}560\text{ см}^{-1}$  с использованием лазера с длиной волны  $532\text{ нм}$ .

Результаты комплексных исследований фазового состава пленок SIPOS показывают, что пленки, полученные без добавления закиси азота  $\text{N}_2\text{O}$ , являются поликристаллическими со средним размером кристаллитов  $\text{Si} \sim 55\text{ нм}$  и содержанием  $\sim 15\text{ ат.}\% \text{ a-Si}$ , который сосредоточен на границах нанокристаллов кремния. Рамановский спектр пленки SIPOS с  $\gamma=0$  (Рис.1) имеет основной максимум на частоте  $521\text{ см}^{-1}$  с полушириной  $5.5\text{ см}^{-1}$ , который по положению и полуширине соответствует спектру монокристаллического кремния (Рис.1). В тоже время в спектре данной пленки в области  $490\text{-}500\text{ см}^{-1}$  появляется плечо, не характерное для объемного кремния и согласно литературным данным [4-6] относится к нанокристаллам  $\text{Si}$  со средними размерами  $\leq 2\text{ нм}$ . Добавка кислорода в соотношении  $\gamma=0.1$  приводит к смещению основного максимума в рамановском спектре до  $517\text{ см}^{-1}$  (Рис.1), что обусловлено уменьшением средних размеров зерен  $\text{Si}$  до  $\sim 5\text{ нм}$  [4,5]. При этом наблюдается заметное затягивание низкочастотного плеча, связанное увеличением вклада  $\text{a-Si}$ , рамановский спектр которого имеет широкий ( $\sim 63\text{ см}^{-1}$ ) максимум на частоте  $480\text{ см}^{-1}$  [4,5]. В то же время рентгеновская дифракция не обнаруживает отражений от кристаллографических плоскостей  $\text{Si}$ . При увеличении  $\gamma$  до  $0.15$  рамановский спектр пленки становится похожим на спектр  $\text{a-Si}$ , однако форма спектра в области  $500\text{-}520\text{ см}^{-1}$  отклоняется от функции Гаусса, что говорит о наличии в данной пленке нанокристаллов  $\text{Si}$ . Результаты оценки соотношения аморфных и кристаллических фаз кремния с помощью рамановской спектроскопии согласуются с данными УМРЭС, согласно которым в пленках с  $\gamma \geq 0.1$  основной является фаза аморфного кремния  $\text{a-Si}$  с некоторым количеством нанокристаллов  $\text{Si}$  со средними размерами  $\sim 1\text{-}5\text{ нм}$ .

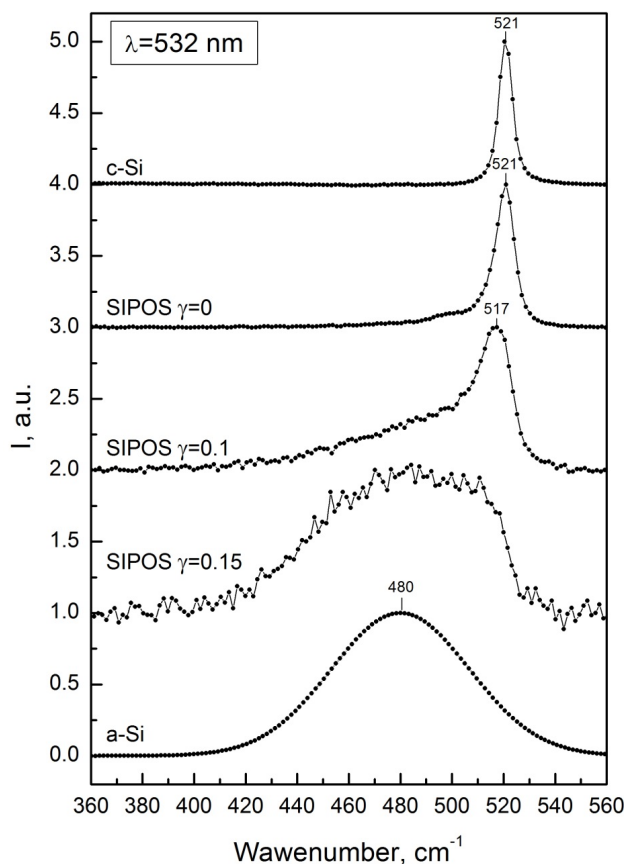


Рис.1 Рамановские спектры пленок SIPOS с различным  $\gamma$ , монокристаллического кремния  $\text{c-Si}$  и аморфного кремния  $\text{a-Si}$  [4].

### Литература

1. Т. Matsushita et. al. IEEE Transactions on electron devices (1976) V. ED-23, p. 826.

2. Э.П. Домашевская и др. Поверхность (2015) №12, с. 24-33.
3. Т.М. Зимкина, В.А. Фомичев. Ультратонкая рентгеновская спектроскопия (Изд-во Ленинградского университета), (1971), 132 с.
4. Z. Iqbal et. al. Solid State Communications (1981), Vol. 37, pp. 993—996.
5. Zhi Li et. al. J. Raman Spectrosc. (2011), V. 42, pp. 415–421.
6. С.В. Гайслер и др. ФТТ (2004), Т.46, №8, с.1484-1488.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ L-АРГИНИНА ГИДРОХЛОРИДА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ГИДРОКСИАПАТИТА КАЛЬЦИЯ

Бартенев В.Н.

*ВГУ, Воронеж, Россия*

*E-mail: BLAD.11.07@yandex.ru*

Одной из проблем интеграции костной и зубной ткани с различными пломбировочными композитами является влияние органической составляющей на минеральную основу костного матрикса гидроксиапатита кальция. Для решения данной проблемы используются различные соединения неродственного костной ткани состава, а также белки и аминокислоты. Целью данной работы являлось исследование влияния, присутствующей в зубном матриксе аминокислоты L-аргинин гидрохлорид (L-Arg×HCL) на структуру и молекулярный состав карбонат замещенного гидроксиапатита кальция (КГАП:  $\text{Ca}_{10-x}(\text{PO}_4)_6-x(\text{CO}_3)_x(\text{OH})_{2-x}$ ) в растворах с различной кислотностью (нейтральной, щелочной и кислотной) и определение её функционального назначения для биокомпозита.

Получение исследуемых композитов осуществлялось поэтапно. На первом этапе с помощью метода химического осаждения из раствора был синтезирован кристаллохимический аналог эмали – КГАП [1]. Для получения органической составляющей биокомпозита использовался водный раствор аминокислоты L-Arg×HCL в содержании аналогичном эмали зуба. Для изменения кислотности использовались растворы  $\text{NH}_4\text{OH}$  и HCL. На последнем этапе, полученные компоненты были подвергнуты механическому перемешиванию на стеклянной подложке. Образцы были исследованы методами РФА (Дрон 4-07,  $\text{Co } \lambda=1,79 \text{ \AA}$ ), ИК (Vertex 70, ATR) и КР (En Spectr, RamMix 532) спектроскопии.

Анализ полученных образцов методом рентгеновской дифрактометрии показал присутствие только дифракционных линий, относящихся к карбонат замещенному гидроксиапатиту кальция и L-аргинину гидрохлориду с перераспределением интенсивности рентгеновских рефлексов. Было установлено, что при изменении кислотности исходных компонент в биокомпозите линия, соответствующая ориентации кристаллитов в направлении (300) (ось c) возрастает (Рис.1).

Сопоставление спектров комбинационного рассеивания (Раманского рассеивания) и ИК спектров аргинина: щелочных, нейтральных и кислотных растворов С и БЕЗ добавления КГАП – не обнаруживает химического взаимодействия и фазовых превращений карбонат замещенного гидроксиапатита кальция (Рис.2).

Исследование молекулярного состава образцов методом ИК спектроскопии позволило установить, что ориентация КГАП в матрице L-аргинина гидрохлорида, обнаруженная методом РФА, приводит к изменению интенсивности полос пропускания в области  $1090, 962 \text{ см}^{-1}$ . Малое изменение  $\text{CH}_2/\text{CH}_3$  групп, а также амидных связей в области  $3400-2800 \text{ см}^{-1}$  больше отражает изменение конформации молекул аргинина в средах с различной кислотностью.

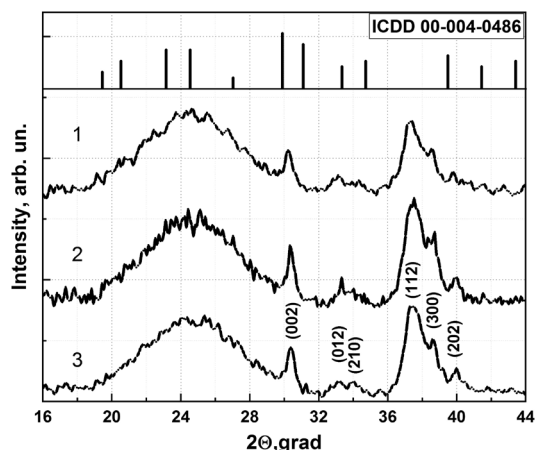


Рис.1. Дифрактограммы полученных материалов: 1 – L-Arg×HCL×КГАП, 2 – L-Arg ×КГАП в присутствии  $\text{NH}_4\text{OH}$ , 3 – L-Arg×КГАП в присутствии HCL и карточки образца базы данных ICDD 00-004-0486 – L-Arg×HCL.

Отсутствие изменений при добавлении ультрадисперсного КГАП (с УЗ разбиением) в положении и интенсивности полос, принадлежащих карбоксильной и амидной связи свидетельствует о механизмах физической адсорбцией L-Arg×HCL на поверхности КГАП, что подтверждает модельное представление [2].

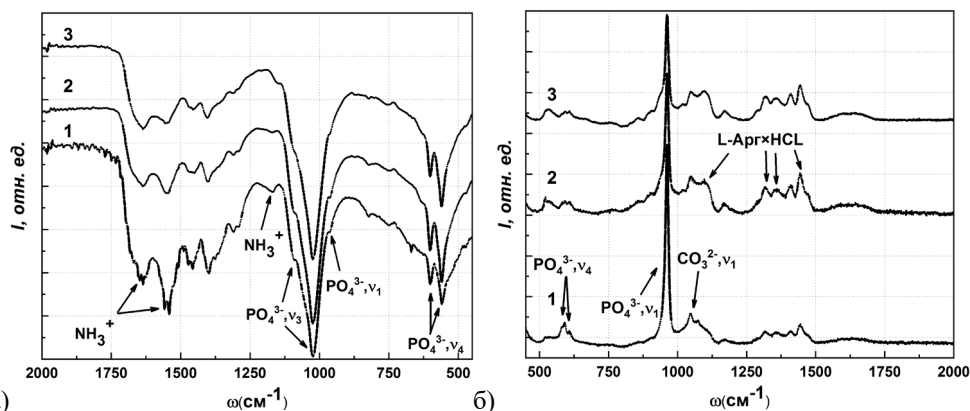


Рис.2. а) ИК спектры, б) Спектры КР (Раман,  $\lambda=532$  нм) исследуемых образцов: 1 – L-Arg×HCL×КГАП, 2 – L-Arg×HCL×КГАП в присутствии  $\text{NH}_4\text{OH}$ , 3 - L-Arg×HCL×КГАП в присутствии HCL.

Анализ данных, полученных в ходе исследования, позволяет сделать вывод, что L-аргинин гидрохлорид больше несет трофическую функцию, способствуя гомогенному распределению гидроксиапатита в биокомпозите. При наблюдении в видимом диапазоне длин волн у композитов L-Arg×HCL×КГАП не обнаруживается рассеивающего фактора, образцы однородны и изотропны. Такое поведение объясняется наличием у L-аргинина гидрохлорида дополнительной  $\text{NH}_2^+$  группы и отсутствием боковой связи  $\text{COO}^-$ , что при взаимодействии приводит к взаимной ориентации молекул L-аргинина гидрохлорида и КГАП с образованием водородной связи.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-29-11008 мк.

## Литература

1. Голощапов Д.Л. Получение нанокристаллического гидроксиапатита методом химического осаждения с использованием биогенного источника кальция // Конденсированные среды и межфазные границы. 2011. Том. 13, № 4. С. 427–441.
2. Чиканова Е.С. Кинетика образования и роста твёрдой фазы из модельных растворов биологических жидкостей: Диссертация. Омск: Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского, 2017. С. 182.

МЕХАНИЗМ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФЕРРОЦЕНА В НАНОЧАСТИЦЫ  
КАРБИДОВ ЖЕЛЕЗА, ИНКАПСУЛИРОВАННЫЕ В УГЛЕРОДНЫЕ ОБОЛОЧКИ,  
ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И ТЕМПЕРАТУР

Баскаков А.О., Старчиков С.С.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

E-mail: arseniybaskakov@gmail.com

В недавних исследованиях трансформации ферроцена  $[\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2]$  под воздействием высоких температур и давлений [1–3] был предложен новый способ синтеза различных наноразмерных нанокомпозитов на основе карбидов железа, инкапсулированных в углеродные оболочки.

Ранее механизм газофазного фотолиза ферроцена внимательно изучался и был определен в ряде исследований [4,5]. Процессы термически индуцированной фрагментации молекул ферроцена были проанализированы как экспериментально, так и теоретически. Однако, возможные превращения ферроцена при воздействии высоких давлений и температур исследованы не были.

В настоящей работе изучены продукты обработки ферроцена при давлении 8,0 ГПа и различных температурах до 1600 °С с использованием нескольких комплементарных методик. Нам удалось установить новый механизм превращения ферроцена в наночастицы карбидов железа  $\text{Fe}_7\text{C}_3@C$  и  $\text{Fe}_3C@C$ , инкапсулированные в углеродные оболочки. Было показано, что образование инкапсулированных наночастиц начинается с образования ядер этих частиц на основе аморфного состояния карбида железа  $\text{Fe}_{1-x}\text{C}_x$  с высоким содержанием углерода. Аморфное соединение  $\text{Fe}_{1-x}\text{C}_x$  появляется в результате конденсации железоуглеродных кластеров, которые являются продуктом разрушения ферроцена при температурах выше 700 °С, превышая предел термической стабильности ферроцена при давлении 8,0 ГПа. Обнаружено, что наночастицы  $\text{Fe}_{1-x}\text{C}_x$  в аморфном состоянии являются немагнитными. Далее установлено, что образование кристаллических модификаций карбидов  $\text{Fe}_7\text{C}_3$  и  $\text{Fe}_3C$  происходит в результате кристаллизации частиц аморфной фазы  $\text{Fe}_{1-x}\text{C}_x$  при температурах выше 1000 °С. Процесс кристаллизации сопровождается выделением избыточного углерода из объема наночастиц  $\text{Fe}_{1-x}\text{C}_x$  на их поверхность и образованием внешней углеродной оболочки наночастиц. При формировании оболочки также частично участвуют углеродные компоненты разложения ферроцена, которые присутствуют в среде, окружающей наночастицу, и которые осаждаются на ее поверхности.

Полученные результаты открывают новое направление для получения фракций аморфной и кристаллической фаз наночастиц карбидов железа различного размера, инкапсулированных в углеродные оболочки. На текущий момент в научной литературе отсутствуют данные о механизме трансформации ферроцена под действием высоких давлений и температур, что говорит о высокой степени научной новизны данной работы. Интерес же научного сообщества к биосовместимым магнитным нанокомпозитам типа «ядро-оболочка» на основе соединений железа, говорит о её высокой актуальности и практической значимости. Полученные нанокомпозиты являются перспективными материалами для использования в качестве внутриклеточных маркеров, диагностических зондов, базовых платформ для доставки лекарств и материалов генной терапии благодаря высокой биосовместимости и низкой химической активности как углерода, так и карбидов железа.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. Авторы выражают благодарности д.ф.-м.н. Любутину Игорю Савельевичу.

### Литература

1. Aksenonkov V. V., Dubitsky G.A., Bagramov R.H., et al. // Fullerenes, Nanotub. Carbon Nanostructures. 2011. Vol. 20, № 1. 41.
2. Davydov V., Rakhmanina A., Allouchi H., et al. // Fullerenes Nanotub. Carbon Nanostructures. 2012. Vol. 20, № 4–7. 451.
3. Davydov V., Rakhmanina A., Kireev I., et al. // J. Mater. Chem. B. 2014. Vol. 2, № 27. 4250.
4. Elihn K., Landström L., Alm O., et al. // J. Appl. Phys. 2007. Vol. 101, № 3. 034311.
5. Fissan H., Kruijs F.E., Boman M., et al. // Appl. Phys. A Mater. Sci. Process. 2008. Vol. 72, № 1. 29.

### ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ МЕДИ В ЦЕОЛИТАХ Cu-MOR, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ТВЕРДОФАЗНОГО ИОННОГО ОБМЕНА, ПО ДАННЫМ EXAFS

Бдоян К.Э., Раздоров В.Н., Ермакова А.М., Дурыманов В.А.,  
Авакян Л.А., Сухарина Г.Б., Прядченко В.В.

*ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия*  
*E-mail: [11kazzersan11@gmail.com](mailto:11kazzersan11@gmail.com)*

Прямое окисление метана до метанола с практической точки зрения является перспективным методом получения метанола из природного газа, допускающим низкие рабочие температуры [1]. Однако, более высокая реактивность получаемого метанола, по сравнению со вступающим в реакцию метаном, способствует полному его окислению, что существенно затрудняет технологический процесс окисления метана до метанола [2, 3]. Для решения такой проблемы разрабатываются различные катализаторы, в том числе на основе медных цеолитов, обеспечивающие селективность реакции окисления метана. Идентификация активных центров меди проблематична, так как Cu-цеолиты обычно содержат медь в различных структурных состояниях: изолированные ионы; димеры; олигомеры; наночастицы [4, 5]. В зависимости от используемого метода синтеза можно получить катализаторы с различным распределением меди по возможным структурным и зарядовым состояниям, что делает важным определение атомной и электронной структуры активных центров в медных цеолитах.

В данной работе методом EXAFS-спектроскопии исследована локальная атомная структура центров меди в Cu-MOR, синтезированном методом твердофазного ионного обмена с использованием CuCl и H-MOR. В соответствии с использованным методом синтеза было предположено, что полученная смесь порошков H-MOR и CuCl, полученная после смешивания, может содержать кристаллиты хлорида меди, а также морденит с частично обменными ионами Cu. Исходя из этого предположения, проведена подгонка Фурье-преобразований спектров Cu K-EXAFS полученных материалов, с использованием следующего выражения для теоретического  $\chi(k)$ :

$$\chi(k) = C \cdot \chi_{\text{CuCl}}(k) + (1-C) \cdot \chi_{\text{Cu-O}}(k),$$

где  $\chi_{\text{CuCl}}(k)$  – симулированная теоретическая функция  $\chi(k)$  хлорида меди, рассчитанная с помощью FEFF8 в рамках метода расширения пути с использованием атомного кластера, содержащего 47 атомов (5 первых координационных оболочек);  $\chi_{\text{Cu-O}}(k)$  соответствует фотоэлектронному обратному рассеянию на ближайшем атоме кислорода, который должен появиться вблизи обменного иона Cu в мордените. В этой модели параметр C означает долю атомов Cu, которые все еще находятся в хлориде, тогда как (1-C) представляет собой долю обменных ионов Cu, перешедших в цеолит.

Определены межатомные расстояния Cu-O и соответствующие координационные числа. Установлена зависимость доли ионов меди в хлориде от температуры отжига.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-32-00586.

### Литература

1. S. Grundner, M. A. C. Markovits, G. Li, M. Tromp, E. A. Pidko, E. J. M. Hensen, A. Jentys, M. Sanchez-Sanchez and J. A. Lercher, *Nature Communications*, 2015, **6**, 7546.
2. T. Sheppard, C. D. Hamill, A. Goguet, D. W. Rooney and J. M. Thompson, *Chemical Communications*, 2014, **50**, 11053-11055.
3. M. H. Groothaert, P. J. Smeets, B. F. Sels, P. A. Jacobs and R. A. Schoonheydt, *Journal of the American Chemical Society*, 2005, **127**, 1394-1395.
4. M. LoJacono, G. Fierro, R. Dragone, X. B. Feng, J. dltri and W. K. Hall, *J. Phys. Chem. B*, 1997, **101**, 1979-1984.
5. Y. Kuroda, S. Konno, Y. Yoshikawa, H. Maeda, Y. Kubozono, H. Hamano, R. Kumashiro and M. Nagao, *J. Chem. Soc.-Faraday Trans.*, 1997, **93**, 2125-2130.

## ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОМАТЕРИАЛА БАКТЕРИОФЕРРИТИНА Dps МЕТОДАМИ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Беликов Е.А.<sup>1</sup>, Праслова Н.В.<sup>1</sup>, Антипов С.С.<sup>1,2,3</sup>, Преображенская Е.В.<sup>1</sup>,  
Озолин О.Н.<sup>2,3</sup>, Куликова Т.В.<sup>1</sup>, Пичкур Е.Б.<sup>4</sup>, Турищев С.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ВГУ, Воронеж, Россия

<sup>2</sup>Институт биофизики клетки РАН, Пущино, Россия

<sup>3</sup>ПуцГЕНИ, Пущино, Россия

<sup>4</sup>НИЦ "Кучатовский институт", Москва, Россия

E-mail: bp4nth3r@mail.ru

Изучение гибридных наноматериалов является одним из крайне перспективных направлений исследований в современной науке. Гибридный объект – это объект, состоящий из органической и неорганической частей. Знания о морфологии, строении, структуре и фазовом составе, а также особенностях взаимодействия гибридных наночастиц с окружающей средой необходимы для понимания их фундаментальных свойств с целью дальнейшего успешного использования этих природоподобных материалов. Одним из примеров таких материалов является бактериоферритин Dps.

Белок Dps *Escherichia coli* является представителем особого семейства бактериальных ферритинов. Основными компонентами наноразмерной частицы являются неорганическое ядро диаметром до 5 nm и белковая оболочка размером ~ 8-9 nm. Белковая часть представляет собой 12 одинаковых субъединиц с известной кристаллической структурой додекамера. Основной природной функцией данного материала является аккумуляция в полый области оксида железа (III), путем доокисления токсичного для живых организмов оксида железа (II). Неорганическое ядро представляет большой научный интерес в связи с тем, что оно обладает фиксированным размером и защищено от окисления органической оболочкой.

Для изучения морфологии поверхности данного материала были применены методы высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии, как на планарной технологии, так и без подложки в криогенных условиях, а также методы сканирующей электронной микроскопии.

Использование метода растровой микроскопии позволило установить необходимость в определенной концентрации белка, содержащегося в буферном растворе, при подготовке образца к исследованиям, так как при его избытке дальнейший анализ данных очень затрудняется. Это происходит в силу многочисленных факторов, например кристаллизации неорганических солей буферного раствора на поверхности пробы.

При анализе результатов, полученных с помощью метода просвечивающей электронной микроскопии, были сделаны выводы о том, что внутри данного наноразмерно-

го биологического объекта действительно находятся неорганические ядра преимущественно сферической формы, диаметром ~5 нм, Также было отмечено отсутствие агломерации ядер.

Результаты высокоразрешающей криоэлектронной микроскопии позволили увидеть способность молекул белка собираться в одномерные плотно упакованные последовательности, состоящие из элементарных структурных единиц, являющихся в проекции микроскопического изображения шестиугольниками. Размеры этих последовательностей могут достигать размеров ячеек углеродной сетки, используемой для подготовки пробы криоэлектронного эксперимента. Толщина при этом не превышает размеров структурной единицы со стороны шестиугольника – 4 нм, диаметром – 8 нм. В ряде случаев наблюдаются формы упорядочения, не являющиеся энергетически выгодными структурами.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2017–2020 гг. – проект № 16.8158.2017/БЧ).

## ВЛИЯНИЕ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ НА МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ И МИКРОСТРУКТУРУ ЧИСТОГО АЛЮМИНИЯ

Белоглазова Н.Д.

*СамНИИУ имени академика С.П. Королева, Самара, Россия*

*E-mail: Natalibeloglazova1997@gmail.com*

На кафедре проводятся исследования магнитоэластического эффекта на медных, алюминиевых сплавах, но в литературе известны данные существования МПЭ в чистом алюминии в работах: Д. В. Загуляева, С. В. Коновалова, В. Е. Громова, В. А. Петрунина, А.К. Сойка, В.Г. Шепелевича, П.А. Свинцова и И.О. Сологуба. Они рассматривают МПЭ и микротвёрдость алюминия.

Целью данной работа является, исследование влияния импульсного и постоянного магнитных полей на микротвёрдость и микроструктуру чистого алюминия.

Используемые температурные режимы подобраны, основываясь на работе Д.В. Загуляева, С.В. Коновалова и В.Е. Громова.[1] Наш эксперимент проведен по аналогии:

Температура отжига T, °C	Время отжига t, ч	Напряжённость магнитного поля, кЭ	Частота ИМП, Гц
В состоянии поставки			
140	2	0	-
		7	-
		7	2
200		0	-
		7	-
		7	2
300		0	-
		7	-
		7	2

образцы предварительно механически полировались, химически травились и отжигались в течение 2 часов с последующим охлаждением в печи. Индукция МП измерялась миллитесламетром с точностью до 0,01 мТл и варьировалась в пределах от 0 до 300 мТл.. Но некоторые условия эксперимента были изменены, таких как: температура отжига 140°C, 200°C и 300°C и отжиг происходил с наложением магнитного поля. Затем измерялась микротвёрдость.

В ходе измерений получились следующие значения:

В ходе измерений получились следующие значения:

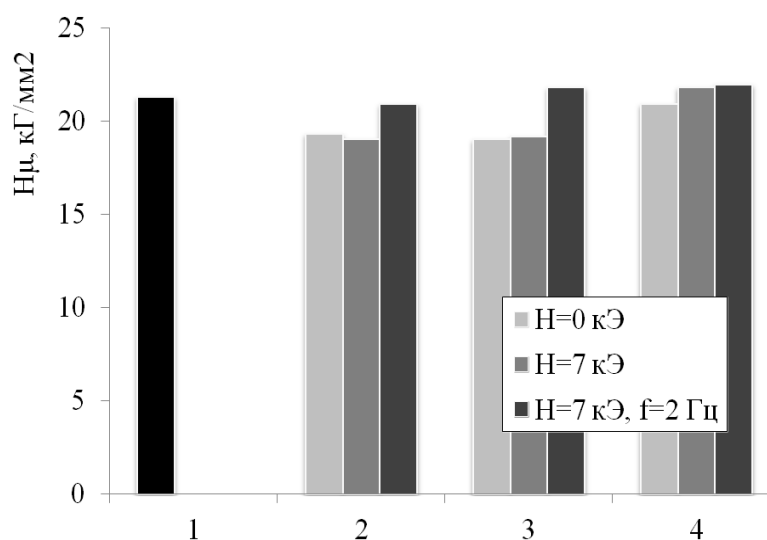
Время отжига $t$ , ч	Температура отжига, °С	Напряженность $H$ , кЭ	Частота $f$ , Гц	$H_{\mu} \pm \Delta H_{\mu}$ , кГ/мм <sup>2</sup>	$(H_{\mu, H \neq 0} - H_{\mu, H=0}) / H_{\mu, H=0}$ , %
Состояние поставки	–	–	–	21,30±0,03	–
2	140	0	0	19,30±0,07	–
	140	7	0	19,10±0,06	2
	140	7	2	23,53±0,38	8
2	200	0	0	19,00±0,02	–
	200	7	0	19,16±0,05	1
	200	7	2	19,92±0,01	15
2	300	0	0	20,90±0,07	–
	300	7	0	21,80±0,04	4
	300	7	2	21,95±0,03	10

Из таблицы видно, что в исходном состоянии среднее значение микротвердости составляет 20,24 кГ/мм<sup>2</sup>.

Анализ результатов показал, что максимальное значение МПЭ в алюминии наблюдается при отжиге температурой 200 °С в течении 2 ч в ПМП амплитудой напряженности 7 кЭ и частотой 2 Гц и составляет 15 %.

Расчеты производились по формуле:  $\zeta = \frac{HV - HV_0}{HV_0}$ , где  $\zeta$  – относительное изменение микротвердости;  $HV$  – значение микротвердости образца, выдержанного в МП;  $HV_0$  – исходное значение микротвердости.

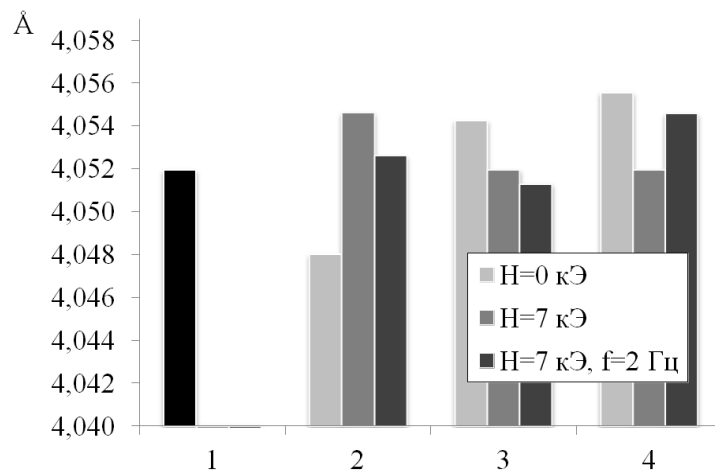
Можно сделать следующие выводы, что увеличение относительного изменения микротвердости в ПМП 4% и в ИМП 15%.



1 – в состоянии поставки; 2 – отжиг при 140°С; 3 – отжиг при 200°С; 4 – отжиг при 300°С.

Далее рассмотрим получившиеся значения для дефрактограммы рентгеноструктурного анализа линии 311. Полученные значения представлены на слайде в виде диаграммы. Результаты рентгенографического анализа показали, измеренный параметр решетки чистого алюминия, отожженного в ПМП и ИМП, отличается от параметра решетки чистого алюминия в состоянии поставки в пределах 0,004 Å. Данное значение находится за пределами ошибки измерения. Обсуждаются механизмы влияния ПМП и ИМП на параметр решетки.





1 – в состоянии поставки; 2 – отжиг при 140°C; 3 – отжиг при 200°C; 4 – отжиг при 300°C.

На основании полученных значений можно сделать следующие выводы:

1. Выполнено экспериментальное исследование влияния ПМП и ИМП амплитудой напряженности 7 кЭ и частотой 2 Гц на микротвердость, параметр решетки и РФА чистого алюминия при температурах отжига 140 °С, 200 °С и 300 °С и времени отжига 2 ч.

2. Наблюдается отрицательный МПЭ, приводящий к увеличению микротвердости до 4 % в ПМП и до 15 % в ИМП.

3. Анализ результатов, полученных рентгенографическим анализом показывает, что в зависимости от режима термомагнитной обработки параметр решетки чистого алюминия изменяется на 0,004 Å по сравнению с образцом в состоянии поставки.

4. Метод РФА показал, что при наложении ПМП и ИМП наблюдается смещение линий в сторону меньших углов, а полуширина всех линий увеличивается, что свидетельствует об искаженности кристаллической решетки.

### Литература

1. Загуляев Д.В., Коновалов С.В., Громов В.Е. Влияние слабых магнитных полей на микротвердость поликристаллического алюминия // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. 2010. №9 (185).
2. Загуляев Д.В., Коновалов С.В., Громов В.Е. Изменение микротвердости технически чистого алюминия А85 в импульсном магнитном поле // Вестник Челябинского Государственного университета. – 2010. – №12. – С. 21 – 24.

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ ИТТРИЯ С ФУЛЛЕРЕНАМИ НА ПОВЕРХНОСТИ Si(111)-A√3×√3-Au

Бондаренко С.В.

*ДВФУ, Владивосток, Россия*

*Email: Sophiebondarenko.29@mail.ru*

В настоящее время значительный интерес представляют альтернативные виды топлива, методы их получения, хранения и транспортировки. Водород считается одним из перспективных альтернативных энергоносителей из-за его высокой энергоемкости и экологичности.

Разработка наиболее экономичных и эффективных способов хранения водорода представляет собой одну из главных технологических проблем водородной энергетики.

Наиболее безопасным методом считается хранение водорода в абсорбированном состоянии.

Многие наноматериалы, такие как углеродные нанотрубки (УНТ), фуллерены, наноструктуры на основе бора и азота, металлические органические каркасные структуры, интенсивно исследовались для хранения водорода. В работе, выполненной, китайскими учеными Зи-Янь Тянь и Шун-Ле Донг из отдела физики Океанского Университета было показано, что добавление атомов переходного металла (иттрия) на поверхность молекулы фуллерена  $C_{60}$  может вызвать заметное усиление адсорбционной способности водорода. [1] Основным преимуществом этой системы является то, что она адсорбирует 12 молекул  $H_2$ , и все связи являются молекулярными. Это показывает, что в такой системе может быть достигнута 100% десорбция молекул водорода, что невозможно достичь в ранее изученных системах металл – фуллерен, где первая молекула водорода диссоциировала на атоме переходного металла, расположенного на фуллере.

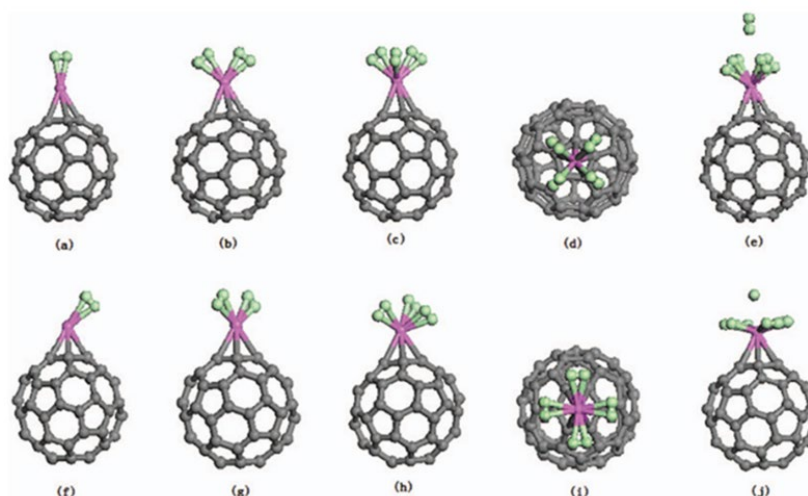


Рис. 1. Серый цвет- фуллерены, фиолетовый- иттрий, зеленый- водород.

Целью моей работы было исследовать взаимодействие атомов иттрия с фуллеренами на поверхности  $Si(111)-\alpha\sqrt{3}\times\sqrt{3}-Au$ .

Формирование поверхности  $Si(111)\alpha\sqrt{3}\times\sqrt{3}-Au$  происходит путем осаждения золота на  $Si(111)$ . В результате чего формируется реконструкция  $Si(111)\alpha\sqrt{3}\times\sqrt{3}-Au$ .

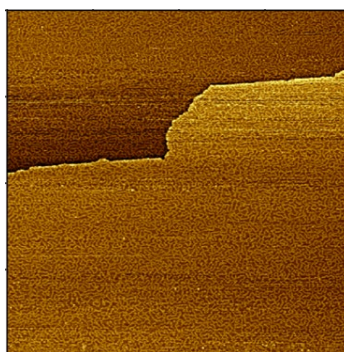


Рис. 2. Поверхностная реконструкция  $Si(111)\alpha\sqrt{3}\times\sqrt{3}-Au$ .

На полученную фазу при комнатной температуре напылялось 2 монослоя фуллеренов  $C_{60}$ . Фуллерены собираются вдоль ступеней террас и от них образуют двухмерные плотно упакованные массивы.

После формирования  $C_{60}/Si(111)\alpha\sqrt{3}\times\sqrt{3}-Au$  происходит импульсное осаждение иттрия (Y) 10,20,40 и 60 секунд.

Таким образом получилась 3-х слойная структура, представленная на рисунке 3.

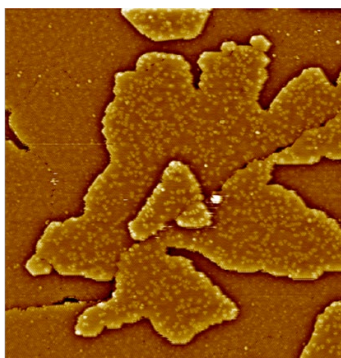


Рис. 3. Поверхностная реконструкция  $\text{Si}(111)\alpha\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Au}$  с двумя монослоями фуллеренов.

### Литература

1. Zi-Ya Tian, Shun-Le Dong, The Journal of Chemical Physics 2014 V. 140 N4 [Электронный ресурс]: <http://i.uran.ru/webcab/system/files/journalspdf/journal-chemical-physics/journal-chemical-physics-2014-v.140-n-4/14042014.pdf>

## ОСОБЕННОСТИ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ XANES К-КРАЕВ 3D-МЕТАЛЛОВ В ГРАНУЛАХ КОМПОЗИТНЫХ СЛОЕВ АМОРФНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР $[(\text{CoFeB})_{60}\text{C}_{40}/\text{SiO}_2]_{200}$ И $[(\text{CoFeB})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{C}]_{46}$ .

Буйлов Н.С.<sup>1</sup>, Тригуб А.Л.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ВГУ, Воронеж, Россия

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: [nik-bujlov@yandex.ru](mailto:nik-bujlov@yandex.ru)

Многослойные наноструктуры (МНС)  $[(\text{CoFeB})_{60}\text{C}_{40}/\text{SiO}_2]_{200}$  и  $[(\text{CoFeB})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{C}]_{46}$  с композитными слоями из гранул CoFeB в углеродной или оксидной матрице получены методом ионно-лучевого распыления на вращающуюся ситалловую подложку двух мишеней, одна из которых была составлена из сплава  $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  со вставками графита или кварца  $\text{SiO}_2$ , а вторая мишень, из которой напылялись прослойки, представляла собой пластину кварца или графита.

Экспериментальные XANES спектры в области К-краев Fe и Co от МНС двух типов были получены на канале станции «Структурное материаловедение» центра синхротронного излучения НИЦ «Курчатовский институт». Тонкая структура спектров XANES (X-ray absorption near edges structure) является результатом интерференции первичной фотоэлектронной волны, выходящей из поглощающего атома, и вторичных, многократно отраженных от ближайших соседних атомов [1].

На рисунке 1 приведены экспериментальные XANES спектры в области К-краев Fe и Co от МНС  $[(\text{CoFeB})_{60}\text{C}_{40}/\text{SiO}_2]_{200}$ , которые имеют подобную, слабо осциллирующую тонкую структуру, характерную не только для аморфных фаз вообще, но также для карбидных и боридных фаз 3d-металлов в особенности. Поэтому для моделирования были отобраны из литературных источников так называемые эталонные спектры двойных и тройных боридных и карбидных фаз Fe и Co. Результаты моделирования показывают, что атомы железа образуют внутрислоевые (в пределах композитных слоев) связи с обоими легкими элементами C и B, тогда как кобальт отдает преимущество связям с углеродной матрицей композитных слоев. При этом, однако, следует принимать во внимание мало различимую рассеивающую способность соседних легких элементов B и C.

Представленные на Рис.2 экспериментальные XANES спектры в области К-краев Fe и Co от МНС с углеродными прослойками  $[(\text{CoFeB})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{C}]_{46}$  обладают еще менее

осциллирующей структурой, но в большей степени отличаются друг от друга, чем в предыдущей МНС с оксидными прослойками. Тем не менее, принципиальное сходство результатов моделирования МНС с углеродными прослойками с предыдущей МНС состоит в том, что оба 3d-металла также образуют внутрислойные связи с бором и кремнием, а атомы железа еще и с кислородом.

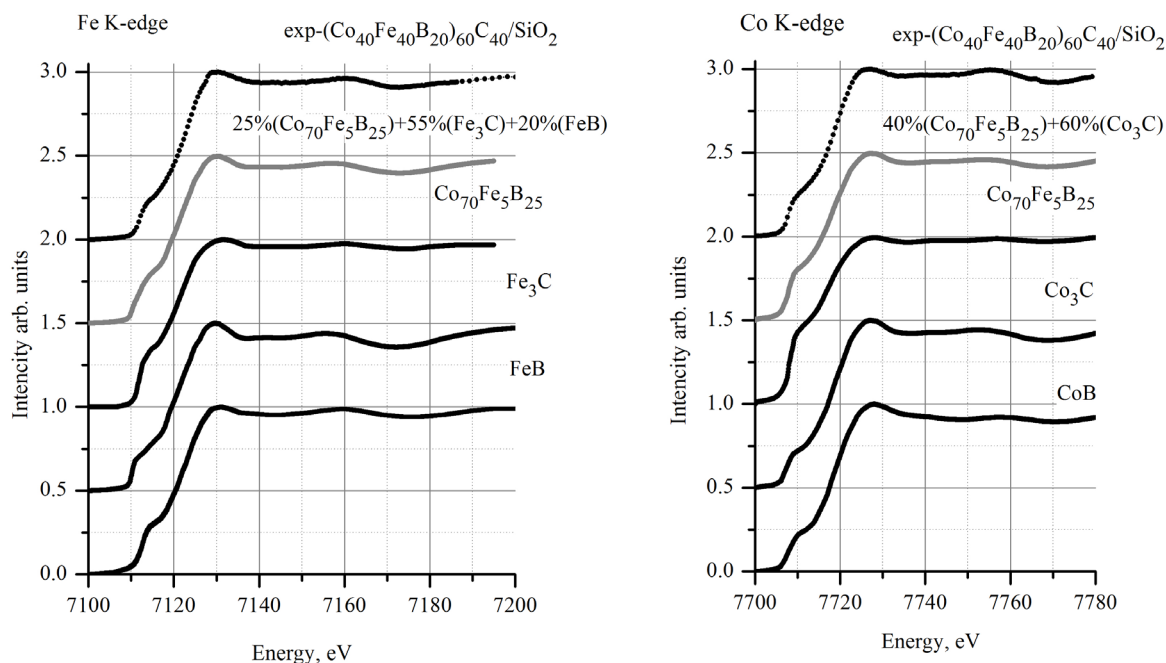


Рис. 1. Экспериментальные XANES спектры в области Fe К-краев (слева) и Co К-краев (справа) от МНС  $[(CoFeB)_{60}C_{40}/SiO_2]_{200}$  (кривые exp), моделированные спектры (сплошные серые кривые) и эталонные спектры (сплошные черные кривые).

Однако остается открытым вопрос о наличии связей 3d-металлов с углеродной прослойкой в этой МНС. Поэтому на Рис.2 мы представляем два практически совпадающих между собой и с экспериментом результата моделирования, которые демонстрируют принципиальную трудность ответа на этот вопрос данным методом.

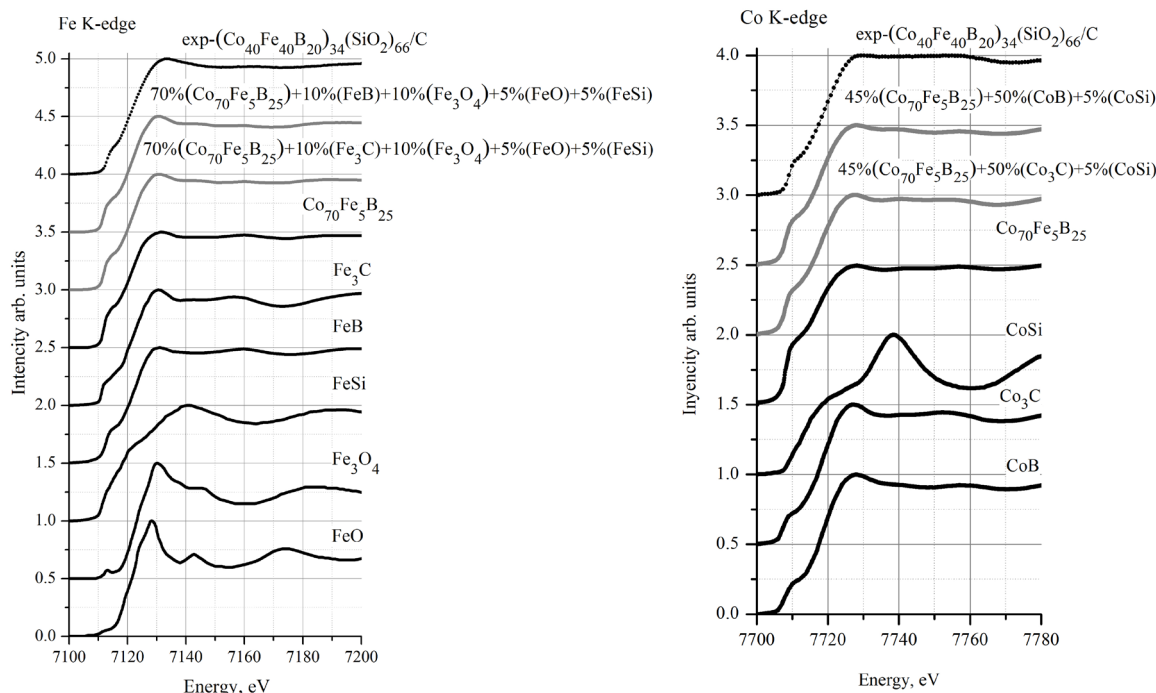


Рис. 2. Экспериментальные XANES спектры в области Fe К-краев (слева) и Co К-краев (справа) от МНС  $[(CoFeB)_{34}(SiO_2)_{66}/C]_{46}$  (кривые exp), моделированные спектры (сплошные серые кривые) и эталонные спектры (сплошные черные кривые).

В целом полученные результаты моделирования свидетельствуют о том, что атомы 3d-металлов Co и Fe остаются связанными друг с другом в металлических гранулах с оболочкой из боридов/карбидов в обеих МНС, и с небольшой добавкой оксидов и силицидов в МНС с SiO<sub>2</sub> в составе композитных металлосодержащих слоев.

#### Литература

1. Muller J.E., Jepsen O. Wilkins J.W., X-ray absorption spectra.//Sol. State Commun. -1982-V.42.P.365.

## ИССЛЕДОВАНИЕ УСЛОВИЙ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ФРАКТАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ НА ПОВЕРХНОСТИ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ.

Бурцев А.А.

*ООО «Новые технологии лазерного термоупрочнения»*

*E-mail: murrkiss2009@yandex.ru*

Исследование структур, возникающих под действием лазерного излучения, имеет большое значение как для фундаментальных задач, так и для инженерных приложений. В первом случае широкие перспективы открывают возможности управления морфологией образующихся кластеров, что позволяет получать новые материалы с ранее неизвестными свойствами. Во втором – контролировать качество изделий во время лазерной обработки [1].

При определенных условиях наблюдается образование фрактальных кристаллов в поверхностном слое [2, 3]. Большой интерес вызывает то, что при различных режимах воздействия (длительность и энергия в импульсе) кристаллы различаются по взаиморасположению (от плотно упакованных до изолированных) и по форме (дендриты, соответствующие форме стохастического фрактала, и кристаллы игольчатой формы, так называемые сферолиты). Проведенный энергодисперсионный рентгеновский анализ химического состава поверхности после воздействия позволяет сделать вывод о формировании поверхностных кристаллов после термоокислительной абляции тонких оксидных пленок [4, 5].

В данной работе проведены исследования процессов самоорганизации при кристаллизации и анализ кристаллических структур, полученных при воздействии импульсного лазера с длиной волны  $\lambda=1,06$  мкм с различными параметрами (энергия импульса  $E_p$  менялась в диапазоне 4 – 16 Дж, длительность импульса  $\tau$  менялась в диапазоне 4 – 16 мс, диаметр пятна  $D$  менялся в диапазоне 0,4 – 1,6 мм). С помощью математического моделирования рассмотрены и проанализированы воздействие лазерного излучения на поверхность стали, а также рост и структура кристаллов. Из расчетных оценок получен диапазон значений толщины слоя расплава, при котором наблюдается устойчивый рост и распределение фрактальных кристаллов по области воздействия.

Работа выполнена в рамках базовой части государственного задания ВлГУ № 3.7530.2019/9.9 БЧ и при поддержке гранта РФФИ №18-07-00943 А.

#### Литература

1. Харанжевский Е.В., Кривилёв М.Д., Галенко П.К. Физика лазеров, лазерные технологии и методы математического моделирования лазерного воздействия на вещество. Ижевск: Изд-во “Удмуртский университет”, 2011. 187 с.
2. Бурцев А.А., Антонов Д.Н., Бутковский О.Я. “Окрашивание поверхности металлов под действием импульсного лазерного излучения” // ЖТФ. – 2014. – V. 84. – №. 10. – С. 83-86.

3. Бурцев А.А., Антонов Д.Н., Бутковский О.Я. “Распределение дендритов, получаемых на поверхности стали в результате воздействия лазерного излучения” // ЖТФ. – 2016. – V. 86. – №. 1. – С. 111-115.
4. А.В. Волков, Н.Л. Казанский, О.Ю. Моисеев, С.Д. Полетаев “Термоокислительная деградация пленок молибдена при лазерной абляции” // ЖТФ. – 2015. – V. 85. – №. 2. – С. 107-111.
5. Притоцкий Е.М., Притоцкая А.П., Бурцев А.А., Панков М.А., Бутковский О.Я., Аракелян С.М. “Экспериментальные исследования по формированию цветности на поверхности металлов лазерным излучением” // Научно-технический вестник ИТМО. – 2018. – V. 18. – № 4. – С. 581–587.

## ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ НА СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ МАССИВА ИЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Воробьева Е.А., Шемухин А.А.

*НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына, Москва, Россия*

*E-mail: vorkate89@mail.ru*

Зачастую для модификации поверхности используют химические методы, которые оставляют побочные включения. В данной работе был применен метод ионного облучения для модификации поверхности массивов из многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ), как ориентированных, так и неориентированных.

Модификация структуры при ионном облучении выражается в последовательном воздействии на поверхностные слои нанотрубок путем образования дефектов в приповерхностных слоях  $sp^2$  углеродной кристаллической решетки. С помощью ионного облучения мы изменяем структуру МУНТ контролируемым образом. При облучении МУНТ сначала создаются точечные дефекты, на которые садится впоследствии кислород. При дальнейшем облучении дефектов становится настолько много, что они начинают сшиваться между собой, что препятствует адсорбции кислорода. При дозах ниже критической интенсивность  $D''$  пика возрастает, поскольку появляется большое количество изгибов в МУНТ. При дозах выше критической происходит разрыв трубок, появляются сшивки между трубками и интенсивность  $D''$  пика резко падает.

При облучении поверхности ионами происходит модификация поверхности, соответственно меняются физические характеристики материала. При облучении небольшой дозой мы создаем микрорельеф поверхности (эффект Лотоса – состояние, при котором жидкость не заполняет шероховатости). При увеличении дозы связи сшиваются между собой, жидкость заполняет шероховатости, поверхность становится более гидрофильной чем изначально, состояние Касси переходит в состояние Венцеля.

В результате выполнения работы была выявлена закономерность связи необходимых параметров облучения с диаметром МУНТ: чем больше диаметр МУНТ – тем больше надо облучать образец для достижения сначала гидрофобности, а затем и гидрофильности.

Было показано, что образование дефектов в многослойных углеродных нанотрубках под влиянием ионного облучения происходит в два этапа: прежде образуются точечные дефекты, т.е. образуются разрывные связи, а затем при определенной критической дозе связи сшиваются, диаметр нанотрубок значительно увеличивается.

Показано, что с помощью ионного облучения можно эффективно управлять смачиваемостью МУНТ: получать гидрофобные, гидрофильные и супергидрофильные поверхности на их основе. На этом основано огромное поле применений МУНТ, включая диоды, биосенсоры, фильтры, суперконденсаторы и т.д.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-72-00149.

СИНТЕЗ И ГАЗОТРАНСПОРТНЫЕ ПАРАМЕТРЫ МЕМБРАН,  
МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПЕНТА-РАЗВЕТВЛЕННЫМИ  
НАНОКРИСТАЛЛИТАМИ ПАЛЛАДИЯ

Воронин К.А., Луценко И.С., Барышев М.Г., Пушанкина П.Д., Петриев И.С.

*КубГУ, физико-технический факультет, Краснодар, Россия*

*E-mail: kiril-voronin@yandex.ru*

Мембраны на основе палладиевых сплавов используются в качестве газодиффузионных фильтров для получения сверхчистого водорода. Одним из способов интенсификации переноса водорода через такие мембраны является увеличение площади активной поверхности. Посредством этого происходит ускорение поверхностных стадий переноса водорода – хемосорбции, диссоциации. Также существенную роль могут играть характеристики структурной организации модифицирующего слоя: энергетическая гетерогенность поверхности, природа поверхности по отношению к активным адсорбционным центрам.

Целью данного исследования являлось получение высокоразвитых структур-модификаторов переноса водорода через палладийсодержащие мембраны и исследование кинетических характеристик транспорта водорода. Подобная модификация приводит к интенсификации процесса массопереноса в температурном диапазоне от 0 до 100 °С, что позволит снизить энергетические затраты в процессе получения высокочистого водорода, а также использовать полученные мембраны для создания высокоэффективного низкотемпературного топливного элемента. Одним из методов модификации водородопроницаемых мембран является получение на их поверхности структур на основе звездообразных нанокристаллитов – «нанозвезд» [1].

Впервые подобные структуры были получены и изучены для золота [2, 3]. Удлиненные пента-разветвленные нанокристаллы золота с формой, напоминающей звезду, были получены с использованием цетилтриметиламмоний бромида в качестве укупорочного ПАВ [4].

В ходе данного исследования были разработаны два типа модификации поверхности методом электролитического осаждения: «нанозвезды» и «нанопоры».

На рисунке 1 представлена микрофотография покрытия, полученного методом «нанозвезды». На рисунке 2 представлена микрофотография покрытия, полученного способом «нанопоры». Микрофотографии были получены с помощью сканирующего электронного микроскопа JSM-7500F («JEOL», Япония).

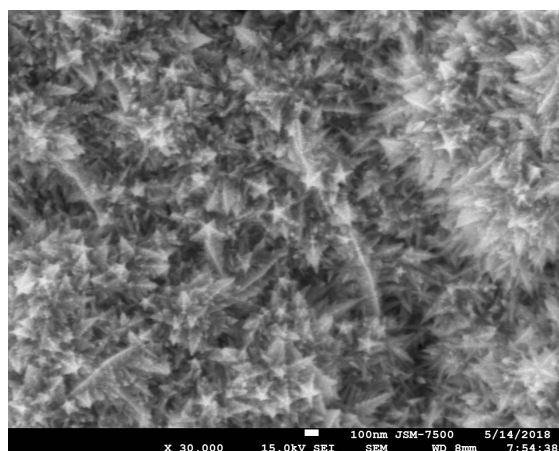


Рис.1. Микрофотография поверхности палладий-серебряных пленок, модифицированных методом «нанозвезды».

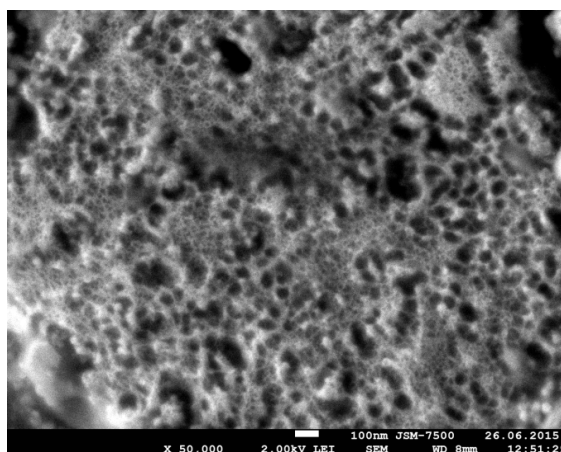


Рис.2 Микрофотография поверхности палладий-серебряных пленок, модифицированных методом «нанопоры».

Измерение водородопроницаемости полученных мембран было произведено с помощью разработанной нами установки на основе микрогазоволюметрического метода [5].

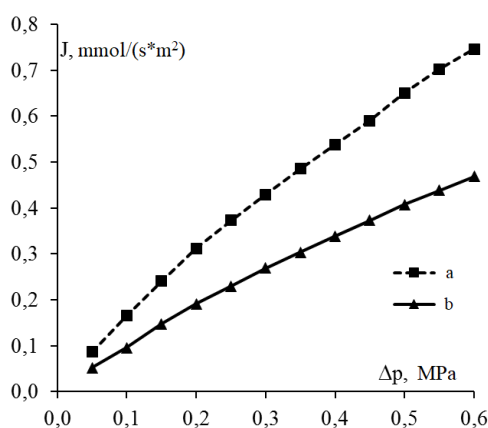


Рис.3. Зависимость плотности потока от избыточного давления водорода на входной стороне мембран с покрытиями, полученными методами «нанозвезды» (а) и «нанопоры» (б).

Как видно из графика на рисунке 3, водородопроницаемость мембран, полученных методом «нанозвезды», выше водородопроницаемости мембран с нанопористым типом покрытия в 1,5-1,7 раз.

Проведенное исследование показало, что скорость проникновения водорода для достаточно тонких палладиевых мембран (< 10 мкм) в условиях низкой температуры (<100 °С) и давления (<0,6 МПа) лимитируется стадией диссоциативно-ассоциативных процессов на границах и может быть значительно (до порядка раз) увеличена, за счет ускорения лимитирующей стадии процесса, посредством образования на поверхности палладиевого наноструктурированного покрытия.

### Литература

1. Kharisov B.I., Kharissova O.V., Ortiz-Méndez U. Handbook of less – common nanostructures Boca Raton, FL: Taylor & Francis Group, 2012. 828 p.
2. Barbosa S., Agrawal A.; Rodriguez-Lorenzo L., et al. // Langmuir. 2010. V. 26. № 18. P. 14943–14950.
3. Kumar P.S., Pastoriza-Santos I., Rodriguez-Gonzalez B., et al. // Nanotechnology. 2008. V. 19. № 1. P. 015606/1–015606/6.
4. Wu H.-L., Chen C.-H., Huang M.H. et al. // Chemistry of Materials. 2009. V. 21. № 1. P. 110–114.
5. Petriev I.S., Bolotin S.N., Frolov V.Y., et al. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. 2018. V. 82. № 7. P. 807-810.



## СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub>

Габдуллин Р. Р.

*МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: pt.os.ir@gmail.com*

Один из интересных свойств фуллерена является способность образовывать полимеры разного пространственного и химического строения [1-3]. Наименее исследованная полимеризация фуллерена при совместном осаждении из молекулярного и ионного пучка происходит одновременно с ростом пленки на подложке. В зависимости от энергии ионов и соотношении ионов и молекул, достигающих подложки, происходит формирование различных типов структур, в том числе композитного состава, состоящих из твердой матрицы, насыщенной неповрежденными молекулами C<sub>60</sub> с ковалентными связями. В работах [3, 4] показаны уникальные механические свойства подобных полимеров («самозалечивание» уколов наноиндентера и динамическая твердость).

Целями нашего исследования являлись определение температурных границ синтеза полимерных композитов на основе C<sub>60</sub>, а также определение зависимости структуры и свойств композита от соотношения ионной и нейтральной компоненты в пучке, из которого формируется покрытие. Для этого была модернизирована вакуумная установка, в которой для регистрации нейтрального потока молекул были установлены кварцевые микровесы. Ионная компонента, которая генерировалась ионным источником с седло-видным электрическим полем, после фокусировки электростатическими линзами проходила через энерго-масс-сепаратор, собранный на постоянных магнитах, и фиксировалась по ионному току на подложку. В энерго-масс-сепараторе из пучка извлекались ионы малых масс и энергий, а также двух и трехзарядные ионы C<sub>60</sub>. На подложку приходили только однозарядные ионы C<sub>60</sub> с энергией, определяемой потенциалом анода ионного источника.

В данной работе мы произвели калибровку кварцевых микровесов при осаждении молекулярного потока, измеряя толщину покрытия с помощью атомно-силового микроскопа, исследовали полученные покрытия методами электронной микроскопии и комбинационного рассеяния.

### Литература

1. K. P. Meletova, G. A. Kourouklis Pressure and Temperature Induced Transformations in Crystalline Polymers of C<sub>60</sub> // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2011. №4.
2. Jorge Laranjeira, Leonel Marquesa, Nuno M. Fortunatoa, Manuel MelleFranco, Karol Strutyński, Manuel Barroso Three-dimensional C<sub>60</sub> Polymers with Ordered Binary-Alloy-Type Structures // Carbon. 2018.
3. Пуха Владимир Егорович СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА ПЛЕНОК, ОСАЖДЕННЫХ ИЗ ИОННЫХ И МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОТОКОВ C<sub>60</sub> .: дис. ... д-р. физ.-мат. наук: 01.04.07 . Харьков, 2014.
4. Penkov O. V. et al. Self-healing phenomenon and dynamic hardness of C<sub>60</sub>-based nanocomposite coatings // Nano letters. – 2014. – Т. 14. – №. 5. – С. 2536-2540.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭРОЗИИ ТУГОПЛАВКИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ РАСТРЕСКИВАНИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПЛАЗМЫ В ТЕРМОЯДЕРНЫХ УСТАНОВКАХ

Гвоздевская Д.С., В. П.Будаев

*НИУ «МЭИ», Москва, Россия*

Анализ поверхности вольфрамовых пластин после плазменных испытаний в токамаке Т-10 выявил эффекты трещинообразования. Эти эффекты наблюдались на краях

вольфрамовых пластин. Условия в плазменном слое над шероховатой поверхностью и расплавом благоприятны для формирования трещин [1].

Множественные эффекты эрозии, такие как растрескивание, плавление поверхностного слоя, движение расплавленного металла по поверхности, рекристаллизация расплавленного слоя формируют шероховатую поверхность [2].

Испытания вольфрамовых мишеней, лимитеров и деверторных пластин в современных токамаках показали возможность значительного изменения структуры поверхности под действием мощных плазменных нагрузок [1]. Для сооружения Международного термоядерного экспериментального реактора, а также разработки проектов термоядерных реакторов ТИН и ДЕМО, требуются полномасштабные испытания материалов, обращенных к плазме. Исключительно важным представляется обеспечить адекватные условия плазменной нагрузки на материалы [1], в которых следует исследовать процессы изменения структуры поверхности, обращенной к плазме. Для таких целей сооружена установка ПЛМ [2].

Вольфрамовые и молибденовые тестовые пластины были испытаны в стационарных гелиевых разрядах в установке ПЛМ. Длительность разрядов в установке ПЛМ достигала 200 минут. Тепловая нагрузка на поверхность тестовых пластин более 1 МВт/м<sup>2</sup>. Температура нагрева пластин достигала 1000°C. На пластинах после испытаний методом электронной микроскопии наблюдалась стохастическая наноструктурированная поверхность с размерами структурных элементов менее 100 нм. На образцах из Т-10 после воздействия в ПЛМ также наблюдается рост W-пуха.

#### Литература

1. Будаев В.П. Результаты испытаний вольфрамовых мишеней дивертора при мощных плазменно-тепловых нагрузках, ожидаемых в ИТЭР и токамаках реакторного масштаба. — ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез, 2015, т. 38, вып. 4, с. 5-31.
2. Будаев В.П., Федорович С.Д., Лукашевский М.В., Мартыненко Ю.В., Плазменная установка НИУ «МЭИ» для испытаний тугоплавких металлов и создания высокопористых материалов нового поколения. — ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез, 2017, т. 40, вып. 3, с. 23-36.

#### МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА БИОФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ НАНООКСИДОВ ЖЕЛЕЗА МЕТОДАМИ ЯМР И МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Гервиц Н.Е.<sup>1,2</sup>, Ткачев А.В.<sup>1</sup>, Журенко С.С.<sup>1,3</sup>, Старчиков С.С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

<sup>3</sup>МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

E-mail: gervicne@lebedev.ru

Уникальное сочетание магнитных, оптических и химических свойств магнитных наночастиц открывает широкие перспективы практического применения в самых разных областях [1]: геномном анализе, адресной доставке лекарств, для гипертермии, в качестве катализаторов и контрастных агентов для магнитно-резонансной томографии (МРТ). [2,3] При разработке материалов для всех этих областей важно учитывать не только химический состав, но и размеры, морфологию, кристаллическую структуру, способы приготовления образцов.

На данный момент контрастные агенты для МРТ принято делить на две группы: позитивные и негативные. Самые популярные, позитивные контрастные агенты содержат парамагнитный гадолиний и сокращают параметр T1, делая патологические ткани более яркими. Негативные контрастные агенты, основанные на ионах железа Fe<sup>2+</sup> и Fe<sup>3+</sup> сокращают параметр T2, затемняя на томографии участки, в которых они находятся. По

сравнению с гадолиниевыми позитивными агентами, негативные менее токсичны и имеют меньше противопоказаний для медицинского применения.[4]

В представленной работе было проведено детальное исследование структурных, магнитных и электронных свойств наночастиц оксида железа функционализированных белком HSA (human serum albumin – сывороточный альбумин человека) методами рентгеновской дифракции, просвечивающей электронной микроскопии, Рамановской спектроскопии, а также ЯМР и Мессбауэровской спектроскопии на ядрах  $^{57}\text{Fe}$ .

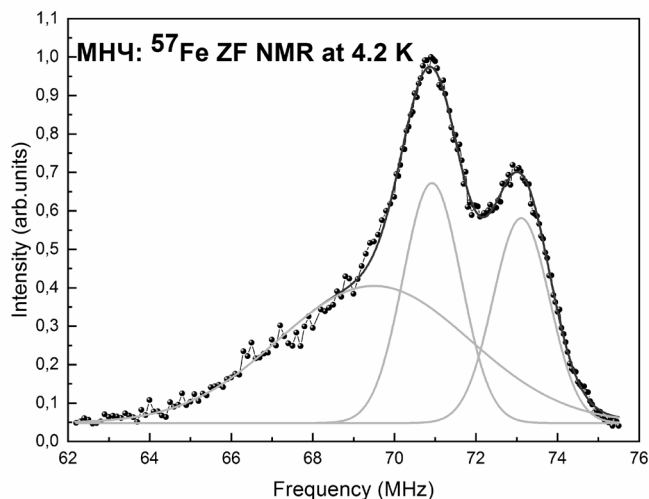


Рис. 1 ЯМР спектр  $^{57}\text{Fe}$  в нулевом поле, измеренный при  $T = 4,2 \text{ K}$  железосодержащих наночастиц, функционализированных HSA (сывороточным альбумином человека).

В результате исследований был определен состав наночастиц, влияние функционализации на магнитные свойства частиц, а также получилось наблюдать вклад от поверхностного слоя ядер железа на ЯМР, ранее не описанный в литературе.

Выражаем благодарность проф. д.ф.-м.н. Гиппиусу А.А., проф. д.ф.-м.н. Любутину И.С., проф. д.ф.-м.н. Демихову Е.И. за помощь в подготовке работы. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” в части исследований электронной микроскопии, и программы Президиума РАН № 32 “Наноструктуры: физика, химия, биология, основы технологий” в части Мессбауэровских измерений.

### Литература

1. Semkina A.S., et al. Multimodal doxorubicin loaded magnetic nanoparticles for VEGF targeted theranostics of breast cancer // *Nanomedicine: nanotechnology, biology, and medicine* 2018 V. 14(5). P. 1733-1742.
2. Abakumov M.A., et al. VEGF-targeted magnetic nanoparticles for MRI visualization of brain tumor // *Nanomedicine: nanotechnology, biology, and medicine* 2015 V. 11(4). P. 825-833.
3. Efremova M., et al. Magnetite-Gold nanohybrids as ideal all-in-one platforms for theranostics // *Scientific Reports* 2018 V. 8. P. 11295.
4. Wei He., et al. Exceedingly small iron oxide nanoparticles as positive MRI contrast agents // *Proceedings of the National Academy of Sciences* 2018 V. 114(9). P. 2325-2330.

### ПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ СТРУКТУРНОЙ АМПЛИТУДЫ

Германович О.И.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: ADogadaytez@yandex.ru*

В рентгеновском дифракционном структурном анализе структурная амплитуда является основной величиной, несущей информацию о расположении и “сорт” атомов в исследуемом объекте и описывается выражением [1]

$$F(\mathbf{H}) = \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i \mathbf{H} \mathbf{r}_j), \quad (1)$$

где  $\mathbf{H}$  – вектор рассеяния, соответствующий дифракционному отражению,  $f_j$  – атомный рассеивающий фактор  $j$ -го атома с координатами  $\mathbf{r}_j$ , а суммирование ведется по всем  $N$  атомам элементарной ячейки.

Вычисление структурной амплитуды не представляет сложностей и реализуется как в кристаллографических программах (см, например, [2]), так и в удобной *web*-утилите  $\chi 0h$  [3]. Однако у существующий программ расчета есть один значительный минус: они позволяют проводить вычисление структурной амплитуды для элементарной ячейки, заданной своей группой симметрии. Это удобно для вычисления в нормальных условиях. Однако такой подход не применим для вычисления структурной амплитуды элементарной ячейки в том случае, когда атомы ячейки смещены из своих положений равновесия из-за какого-либо внешнего воздействия. В этом случае атомы смещены, и симметрия ячейки изменяется или, даже, совсем пропадает.

В этой связи мной была написана программа, которая вычисляет структурную амплитуду элементарной ячейки в которой положения всех атомов заданы непосредственно, не используя какие-либо операции симметрии. При расчетах используются атомные рассеивающие факторы, заданные в таблицах Хенке [4] для энергии падающего излучения в диапазоне 10 эВ – 30 кэВ.

После завершения тестовых вычислений, программа будет размещена в открытом доступе на сайте кафедры физики твердого тела физического факультета МГУ.

### Литература

1. Илюшин А.С., Орешко А.П. Дифракционный структурный анализ в 2х частях. Часть 1. М.: Юрайт, 2017.
2. <http://www.crystalmaker.com/singlecrystal/index.html>
3. <https://x-server.gmca.aps.anl.gov/x0h.html>
4. [http://henke.lbl.gov/optical\\_constants/asf.html](http://henke.lbl.gov/optical_constants/asf.html)

## МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ ПЛОЩАДИ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРРИГИДРИТА НА ПРОЦЕСС ЖЕЛЕЗОРЕДУКЦИИ

Гонтарев И.Ю., Грачева М.А., Антонова А.В.

МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

E-mail: 6773123@gmail.com

В природе существуют микроорганизмы, способные восстанавливать оксиды и гидроксиды железа, в данном процессе они получают энергию для жизнедеятельности и роста. Такие организмы называют железоредукторами. Они используют трехвалентные атомы железа в качестве акцептора электронов. Донором электронов могут служить как органические, так и неорганические субстраты [1]. В качестве акцептора электронов часто используют ферригидрит ( $5\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ ) – гидроксид железа, широко распространенный в почвах, осадках и поверхностных водах.

Настоящая работа посвящена изучению методами мессбауэровской спектроскопии влияния изменения площади поверхности ферригидрита, доступной для железоредукции бактерией *Geoalkalibacter ferrihydriticus*, на процесс биовосстановления.

Для проведения исследований был синтезирован ферригидрит, и затем добавлен в среду бактериального роста алкалофильной диссимильаторной бактерии *G. ferrihydriticus*. Данная бактерия способна восстанавливать аморфный ферригидрит, антрахинон-2,6-дисульфонат (синтетический аналог гуминовых кислот),  $\text{Mn(VI)}$  и  $\text{S}^0$ , окисляя ацетат [2]. В данной работе исследовались твердые минеральные фазы, полу-

ченные в результате роста бактерии в сосудах различной ориентации, содержащих минеральную среду и ферригидрит. Таким образом, были достигнуты различные площади поверхности минерала  $S_1 < S_2 < S_3$ , доступные для восстановления бактерией. Мессбауэровские спектры исследуемых образцов получены при комнатной температуре. Обработка спектров проводилась в рамках модельной расшифровки парциальными спектрами с использованием программы SpectrRelax [3].

Анализ спектров показал, что в результате роста бактерии *G. ferrihydriticus* в присутствии 10 мМ ферригидрита в минеральной среде наблюдается процесс восстановления атомов железа с образованием новой фазы, содержащей двухвалентные атомы железа. А в случае площади поверхности  $S_3$ , доступной для восстановления, кроме того, наблюдается формирование сидерита ( $FeCO_3$ ).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00-349

### Литература

1. Lovley D.R. Magnetite formation during microbial dissimilatory iron reduction // *Iron Biomaterials*, 1990, p. 151-166.
2. Zavarzina D.G., Kolganova T.V., Boulygina E.S., Kostrikina N.A., Tourova T.P., Zhilina T.N. *Geobacter ferrihydriticus* gen. nov. sp. nov., the first alkaliphilic representative of the family *Geobacteraceae*, isolated from a soda lake // *Microbiology* (2006) 75(6) p. 673
3. Matsnev M.E. and Rusakov V.S. SpectrRelax: An Application for Mössbauer Spectra Modeling and Fitting // *AIP Conference Proceedings* (2012) 1489, pp 178-185

## МОРФОЛОГИЯ И СТРУКТУРА ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ СИЛИЦИДОВ МАРГАНЦА

Гончарь Н.А.

*РХТУ имени Д.И.Менделеева, Москва, Россия*

*E-mail: natashag13@list.ru*

Тонкие пленки силицидов марганца обладают огромным потенциалом как материал для оптоэлектроники, микро-, нано-, фотоэлектроники и других областей современной науки [1]. Пленочные структуры, в отличие от объемных, расширяют область применения данного материала, так как вся техника нашего поколения и уж тем более грядущих имеет тенденцию к миниатюризации. Одними из главных преимуществ силицидов переходных металлов, а в особенности силицидов марганца, являются высокие термоэлектрические свойства, экологическая чистота исходных веществ и невысокая стоимость материала. Высший силицид марганца (ВСМ) –  $MnSi_{1.7}$  является одним из наиболее перспективных термоэлектрических соединений [2,3].

В данной работе для получения тонких пленок ВСМ использовался метод магнетронного распыления на подложку слюды из мишени монокристалла ВСМ, выращенного методом Бриджмена в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН. Данный метод позволяет получать материалы с заданными характеристиками.

Для максимально полной и достоверной информации о структурной организации, а также фазовом составе данных пленок были использованы методы растровой электронной микроскопии на оборудовании Центра "Диагностики материалов" ИК РАН ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН.

Морфология и поперечный срез полученных образцов были исследованы на двухлучевом растровом электронно-ионном микроскопе с полевым эмиссионным источником электронов FEI Scios. Поперечный срез был получен методом травления фокусированным ионным  $Ga^+$  пучком. Элементный состав полученных пленок определялся с

помощью энергодисперсионного рентгеновского микроанализа на микроскопе FEI Quanta 200 3D.

Исследования показали, что на подложке слюды формируется сплошная, пористая пленка силицида марганца толщиной  $\sim 700$  нм. Размер пор варьируется от 0.05-0.1 мкм. После отжига при температуре 700 К наблюдалось изменение морфологии пленки – структура становится более плотной, наблюдается однородная зернистая структура ВСМ.

Измерение термоэлектрических свойств пленок ВСМ до и после отжига показало, что в процессе термического отжига на воздухе при температуре 600 К происходит резкий рост термоэдс и электросопротивления пленок.

### Литература

1. S.L. Zhang, M. Ostling, Crit. Rev. Solid State Mater. Sci., 28,1 (2003).
2. A.T. Burkov, Y. Vinzelberg, J. Scumann, T. Nakama, K. Ygasaki. J.Appl. Phys. 95, 3229. 2001.
3. А.С. Орехов, Т.С. Камилов, Б.В. Ибрагимова, Г.И. Ивакин, В.В. Ключковская. ФТП, 51(6), 2017, с. 740-743.

## ВЛИЯНИЕ ПЕРИОДА ПЛАЗМОННОЙ СТРУКТУРЫ ФОТОПРОВОДЯЩЕЙ АНТЕННЫ НА ГЕНЕРАЦИЮ ТЕРАГЕРЦЕВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Горбатова А.В., Хусяинов Д.И., Буряков А.М.

*РТУ МИРЭА, физико-технологический институт, Москва, Россия*

*E-mail: gorbatova.anastasiya@mail.ru*

Фотопроводящие антенны (ФПА) наиболее широко используются в методике терагерцевой (ТГц) спектроскопии временного разрешения для генерации и детектирования терагерцевых импульсов. Существует отдельное направление исследований, связанное с изучением влияния геометрии электродов антенн на эффективность их оптико-терагерцевого преобразования [1,2]. В 2013 году исследовательской группой Берри [3] было показано, что включением электродов с плазмонной структурой в ФПА можно достичь значительного усиления генерируемого ТГц сигнала по сравнению с обычными антеннами того же типа. Однако влияние периода плазмонной структуры на интенсивность, генерируемого антенной ТГц импульса, никем ранее не исследовалось.

Для анализа влияния параметров плазмонной структуры на интенсивность ТГц излучения была изготовлена серия ФПА с периодами плазмонной решетки 100 нм, 250 нм и 500 нм. Ширина зазора между электродами для всех антенн составляла 20 мкм. В качестве материала антенн использовалась многослойная структура i-LT-GaAs/Si:GaAs, выращенная методом молекулярно лучевой эпитаксии на подложке GaAs (100). Параметры генерации ТГц излучения антеннами были изучены при помощи методики терагерцевой спектроскопии временного разрешения с кристаллом ZnTe в качестве детектора.

Существует прямая связь между электрическим полем смещения и величиной результирующего ТГц поля генерируемого антенной [4]. В данной работе с помощью программного пакета COMSOL Multiphysics для каждого значения периода плазмонной решетки было получено распределение напряженности электрического поля в антенне. Полученные в ходе моделирования результаты оказались сопоставимы с экспериментально полученной зависимостью интенсивности ТГц сигнала от периода плазмонной структуры антенны. Определен наиболее оптимальный период плазмонной решетки для ТГц генерации, он составил 125 нм.

Работа поддержана грантом централизованного фонда РТУ МИРЭА № НИЧ-42.

### Литература

1. Jarrahi M. Advanced Photoconductive Terahertz Optoelectronics Based on Nano-Antennas and Nano-Plasmonic Light Concentrators // IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol. 2015. Vol. 5, № 3. P. 391–397.
2. Yardimci N.T., Jarrahi M. High Sensitivity Terahertz Detection through Large-Area Plasmonic Nano-Antenna Arrays // Sci. Rep. 2017. Vol. 7, № 1. P. 42667.
3. Berry C.W., Wang N., Hashemi M.R., Unlu M., Jarrahi M. Significant performance enhancement in photoconductive terahertz optoelectronics by incorporating plasmonic contact electrodes // Nat. Commun. 2013. Vol. 4, № 1. P. 1622.
4. Zhang, Xi-Cheng, and Jingzhou Xu. Introduction to THz wave photonics. Vol. 29. New York: Springer, 2010. Photonics. 2010. P. 27–48.

## ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ Si-Au НАНОЧАСТИЦ

Гордеев И.С.

*МФТИ, Москва, Россия*

E-mail: [gordeevilu@gmail.com](mailto:gordeevilu@gmail.com)

Кремниевые нанобъекты очень интересны для нанофотоники из-за уникальных оптических свойств, зависящих от атомарной структуры. Таким образом, изучение структурных особенностей этих частиц, таких как размер зерен и распределение атомов Au в кристаллических зернах и между ними представляет интерес. В работе изучено влияние скорости охлаждения на структуры наночастиц Si-Au (НЧ) для различных размеров НЧ и концентраций Au. Моделирование проводилось в квазидвухмерном случае: один из размеров расчетной ячейки составлял около 10 нм, использовались периодические граничные условия. В свою очередь, это может привести к меньшим размерам зерен в моделировании по сравнению с экспериментом. Поэтому было проведено дополнительное одномерное моделирование для изучения зависимости размера зерна от концентрации Au в Si-Au НЧ. Кроме того, проанализировано движение границы зерен кристалла и изменения распределения золота при кристаллизации.

Результаты моделирования показывают, что атомы золота пытаются покинуть зону кристаллизации путем атомной диффузии. Таким образом, этот эффект приводит к меньшему размеру зерна для больших концентраций Au. Расчеты использовался потенциал межатомного взаимодействия формата ADP[1].

### Литература

1. S.V. Starikov et al. / Computational Materials Science 142 (2018) 303–311

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ДЛЯ АНАЛИЗА СИГНАЛОВ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ

Гошкодеров В.А. Гошкодерова Е.А. Абу Газал А.А. Сурин В.И.

*НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия*

E-mail: [vovagosh@mail.ru](mailto:vovagosh@mail.ru), [liz.gomezova@yandex.ru](mailto:liz.gomezova@yandex.ru),  
[gazal.ayman@yandex.ru](mailto:gazal.ayman@yandex.ru), [VISurin@mephi.ru](mailto:VISurin@mephi.ru)

Под нагрузкой в твердом теле протекают структурные изменения, сопровождающиеся излучением механических волн напряжений в широком диапазоне частот. Процессы пластической деформации приводят к изменению профиля поверхности: изменяются параметры волнистости и шероховатости. Разработанная нами методика электрофизической диагностики и неразрушающего контроля материалов позволяет реги-

стрировать указанные изменения, исследовать частотные и частотно-временные характеристики сигналов [1].

Для изучения спектра механических волн напряжений, излучаемых структурным дефектом, использовали методы интегральных преобразований (Фурье и вейвлет-преобразование) и частотно-временного анализа [2].

Построены спектрограммы  $P_s f(u, v)$ , полученные в процессе ползучести образцов из алюминия и меди. Спектрограмма позволяет оценить значение энергии сигнала  $f$  в частотно-временной окрестности точки  $(u, v)$ . Для исследования хребтов спектрограммы вычисляли мгновенные частоты по локальным максимумам функции  $P_s f(u, v)$ . Преобразование Фурье с окном  $Sf(u, v)$  вычисляли с помощью симметричного окна  $g(t) = g(-t)$  в интервале времени  $[t_1, t_2]$ . В качестве оконной функции использовали функцию Гаусса.

### Литература

1. Сурин В.И., Оборин С.Б. Обнаружение усталостных повреждений при многоцикловых испытаниях материалов//Динамика систем, механизмов и машин: Материалы VI Международной научно-технической конференции. Омск: ОмГТУ. 2007. Кн.1. с. 345-348.
2. Сурин В.И., Губина Т.В., Абу Газал А.А., Вебер А.Е. Спектральный анализ диагностических сигналов на основе интегральных преобразований// Информационные технологии в проектировании и производстве. Москва, 2016, №2. с. 37-44.

## СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИРОДНЫХ И ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЦЕОЛИТОВ

Демьяненко А. В.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: demianenko.av14@physics.msu.ru*

Цеолиты – большая группа близких по составу и свойствам минералов, представляющих собой водные алюмосиликаты. Общая химическая формула цеолитов может быть выражена следующим образом:  $M_{x/n}[(AlO_2)_x (SiO_2)_y] \cdot wH_2O$ , где  $M$  – катион с валентностью  $n$ , отношение  $y/x$  в зависимости от структуры принимает значения от 1 до 5, а  $w$  – число молекул воды. Кристаллическая структура цеолитов образована тетраэдрическими группами  $SiO_4$ ,  $AlO_4$ , объединёнными общими вершинами в трёхмерный каркас, пронизанный системой каналов с входными окнами, представляющими собой кольца из 6, 8, 10 или 12 атомов кислорода. Цеолиты обладают замечательными адсорбционными, ионообменными и каталитическими свойствами; также в нанотехнологиях используются, как молекулярные сита.

В данной работе рассматриваются природные образцы клиноптилолита  $Ca_3(Si_{30}Al_6)O_{72} \cdot 20H_2O$ , одного из минералов группы цеолитов, полученного из Чугуевского (Россия, Приморский край) месторождения. Этот тип цеолита довольно распространён в земной коре и часто используется в промышленности. Уникальные ионообменные свойства клиноптилолита, в частности высокая селективность к радиоактивному изотопу  $^{90}Sr$ , активно использовались для дезактивации поражённых областей почв и водоёмов после аварий на Чернобыльской АЭС и на АЭС Фукусима-1. Также, последнее время остро стоит вопрос об экологической ситуации на полигонах твёрдых бытовых отходов и свалках. Цеолиты могут эффективно адсорбировать токсичные газы и жидкости, что открывает перспективы для их использования в этой области. Для повышения эффективности сбора отработавшего клиноптилолита сотрудниками ГЕОХИ РАН был предложен способ придания магнитных свойств образцам цеолита, что, очевидно, позволит использовать магниты в процессе сбора. Суть метода заключается в



добавлении к раствору с синтезированным магнетитом фракций клиноптилолита, в результате образуется сорбционный материал тёмно-коричневого цвета.

Целью исследования является сравнительный анализ природных образцов клиноптилолита и их химически модифицированных вариантов. В ходе работы были сделаны снимки на цифровом оптическом микроскопе VHX5000 Keyence, а также на сканирующем электронном микроскопе Quanta 3D FEG. Эксперименты по рентгеновской дифракции проводились на дифрактометре PANalytical Empyrean. Расчёт дифрактограмм проводился при помощи программы HighScore Plus.

Данные о размерах частиц магнетита, полученные с помощью СЭМ, и размерах входных окон каналов, и картина, полученная на цифровом оптическом микроскопе, позволяют сделать вывод о распределении частиц магнетита по поверхности образца. Рентгендифракционный анализ не выявил изменений в структуре образца цеолита после модификации (её параметры остались неизменными). Не произошло изменений и в структуре самого магнетита. Это позволяет сделать вывод о том, что магнетит не проникает в каналы клиноптилолита.

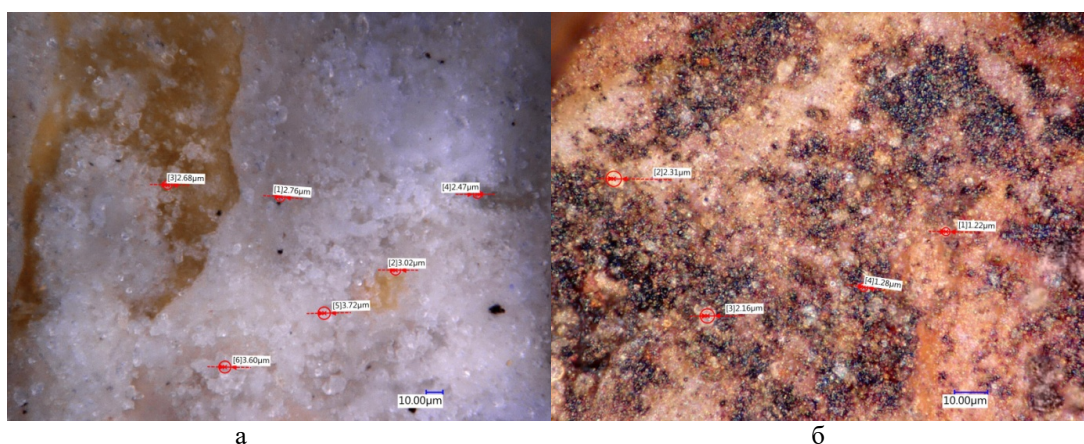


Рис. 1. Снимки образцов клиноптилолита, а – природного, б – модифицированного, полученные на цифровом оптическом микроскопе VHX5000 Keyence.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что магнетит образует химические связи только с поверхностью цеолита, и связь, предположительно, имеет электростатический характер. Также модификация магнетитом не оказывает негативного влияния на адсорбционную способность цеолита.

### Литература

1. Д. Брек. Цеолитовые молекулярные сита. // Издательство «Мир», Москва 1976.

## ИССЛЕДОВАНИЕ РОСТА ДЕНДРИТОВ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ПОВЕРХНОСТНОГО СПЛАВА Pt/Cu(111)

Докукин С.А.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: dokukin.sergey@physics.msu.ru*

Бурное развитие физики наноструктур обусловлено возможностью использования их необычных свойств в промышленности. Было обнаружено, что дендритообразные структуры обладают высокой каталитической активностью. В экспериментальных исследованиях поверхностного сплава Pt/Cu(111) с помощью сканирующего туннельного микроскопа было обнаружено появление дендритообразных структур [1-3]. Дендритообразные кластеры в работе [1] состоят из атомов меди, окруженных атомами платины. Появление таких кластеров объясняется в модели, согласно которой пальцеобразные

выросты из атомов платины и меди истончаются у основания и могут оторваться от края ступени [4]. Тем не менее, появление дендритов, которые расположены вдали от края ступени с центральной частью, состоящей из атомов платины [2] не объясняется с помощью вышеупомянутой модели.

В данной работе для моделирования формирования поверхностного сплава Pt/Cu(111) использовался метод самообучающегося кинетического Монте Карло, аналогичный тому, который использовался в работе [4]. Моделирование формирования сплава, состоящего из атомов меди и платины, сопровождается появлением большого количества энергетических ям — совокупности состояний, диффузионные барьеры прыжков между которыми существенно меньше диффузионных барьеров переходов в другие состояния. В такой ситуации система совершает огромное число прыжков внутри потенциальных ям и моделирование становится неэффективным. Для ускорения алгоритма использовался метод, описанный в работе [5].

В результате исследования была найдена зависимость фрактальной размерности и относительной длины границы дендритообразных кластеров в поверхностном сплаве Pt/Cu(111) от скорости напыления атомов, температуры подложки и состава кластера. Обнаружено и объяснено появление Y-образных кластеров. Произведено сравнение с обобщенным методом агрегации, ограниченной диффузией [6]. Найдены параметры, при которых формирующийся при моделировании дендрит качественно похож на представленный в экспериментальной работе [2].

### Литература

1. Luccy F. R., Atomic scale surface structure of Pt/Cu(111) surface alloy // J. Phys. Chem. C 118, 3015 (2014).
2. Soy E., Liang Z., Trenary M. Formation of Pt and Rh nanoclusters on a graphene on Cu(111) // J. Phys. Chem. C 119, 24796 (2015).
3. Todoroki N. Electrochemical reduction of CO<sub>2</sub> on Ni- and Pt-epitaxially grown on Cu(111) // *Electrocatalysis* 7, 97 (2016).
4. Dokukin S.A., Kolesnikov S.V., Saletsky A.M., Klavsyuk A.L. Growth of the Pt/Cu(111) surface alloy: Self-learning kinetic Monte Carlo simulations // J. Alloy. Compd. 763, 719 (2018).
5. Dokukin S.A., Kolesnikov S.V., Saletsky A.M., Efficient energy basin finding method for atomistic kinetic Monte Carlo models // *Comp. Mater. Sci.* 155, 209 (2018).
6. Ogura S. Dendritic to non-dendritic transition in Au island investigated by scanning tunneling microscopy and Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. B* 73, 125442 (2006).

## ПРИМЕСНАЯ ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК Pb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Te

Дудин В.С.

*МГУ имени М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: vsd97@list.ru*

Твёрдые растворы на основе халькогенидов свинца, в том числе и PbSnTe, рассматривались, как перспективные материалы для создания приёмников, работающих в ТГц и суб-ТГц диапазонах, поскольку ширина запрещённой зоны в данных материалах варьируется в широком диапазоне в зависимости от стехиометрического состава раствора [1]. Однако, дефекты в этих материалах являются электрически активными, что приводит к высокой собственной концентрации носителей даже в нелегированных полупроводниках [1-3] и существенно мешает созданию приборов на их основе. Но выяснилось, что намеренное легирование халькогенидов свинца рядом примесей (в частности индия) приводит к стабилизации уровня Ферми, в том числе и в запрещённой зоне при некоторых составах растворов [3]. Это позволило использовать данные материалы

в качестве приемников излучения терагерцевого (ТГц) и, даже, суб-ТГц диапазонов [4]. Тем не менее вопрос о природе состояний, энергия которых меньше ширины запрещенной зоны остается открытым.

В данной работе исследовались спектры фотопроводимости в эпитаксиальных плёнках  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ .

Исследуемые образцы были выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии в ИФП СОО РАН [5] на подложке  $\text{BaF}_2(111)$ , толщина плёнки – 1,9 мкм. Образцы были легированы индием. Исследования проводились на Фурье-спектрометре Bruker Vertex 70v при низких температурах. В качестве источника использовался глобар, в качестве светоделиителя – Mylar Multilayer. Образцы размером  $4 \times 2$  мм с полосковыми контактами размещались в проточном криостате Oxford Instruments OpistatCF, который устанавливался в спектрометр так, чтобы образец находился в фокусе пучка излучения. Рабочий диапазон системы составлял  $30\text{--}680\text{ см}^{-1}$ , спектральное разрешение –  $4\text{ см}^{-1}$ . Имелась функция дополнительной подсветки образца синим светодиодом.

На рисунке 1 можно наблюдать характерный спектр фотопроводимости в данной структуре. В спектрах данного образца наблюдаются как особенности, связанные с межзонными переходами электронов, так и субщелевые особенности с максимумами на  $300\text{ см}^{-1}$  (1) и  $490\text{ см}^{-1}$  (2). Стоит отметить, что при увеличении температуры сначала красная граница сдвигается влево, в зону меньших энергий, а после  $T > 25\text{ К}$  – в обратном направлении. Это свидетельствует о сдвиге Бурштейна-Мосса, вклад которого уменьшается при повышении температуры из-за возрастающего темпа рекомбинации зарядов. Увеличение температуры приводит к «исчезновению» субщелевых особенностей при  $T_1 \geq 15\text{ К}$  и  $T_2 \geq 17\text{ К}$  соответственно.

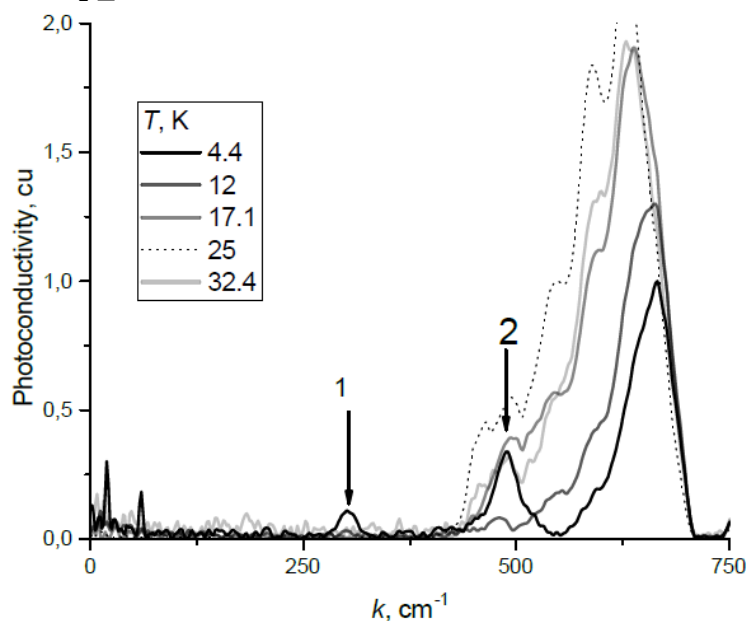


Рис. 1 Спектры фотопроводимости в образце  $\text{PbSnTe}$  при различных температурах.

### Литература

1. D. Khokhlov (Ed.) Lead Chalcogenides: Physics & Applications (New York: Taylor & Francis, 2003).
2. G. Bauer et al. // J. Appl. Phys. 47, 1721 (1976).
3. Б. А. Волков, Л. И. Рябова, Д. Р. Хохлов // УФН 172, 875 (2002).
4. А. В. Галеева, Л. И. Рябова, А. В. Никорич и др. // Письма в ЖЭТФ 91, 37 (2010).
5. А. Э. Климов, В. Н. Шумский // Матричные фотоприемные устройства Н., Наука, (2001).

## ОСОБЕННОСТИ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В КРЕМНИЕВЫХ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Евсеев А.П., Миннебаев Д.К., Кожемяко А.В.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия**E-mail: ap.evseev@physics.msu.ru*

В связи с тенденцией использования наночастиц кремния в нанoeлектронике и биомедицинских направлениях возникает необходимость развития методик, позволяющих как контролировать, так и модифицировать их физические свойства с высокой точностью и повторяемостью результата воздействия, например, путем инженерии дефектов. Воздействие пучками ионов является перспективным методом модификации состава и структуры вещества.

Дефекты, образующиеся при ионном облучении, изменяют электронные свойства материалов, которые в свою очередь влияют на такие свойства, как поглощение света, люминесценция, перенос и разделение носителей заряда. Однако параметры ионного облучения для наноразмерных материалов значительно отличаются от параметров для массивных структур ввиду наличия развитой поверхности и резкой границы раздела. В ряде работ показано, что с помощью ионного облучения можно эффективно управлять свойствами кремниевых и углеродных наноматериалов [1, 2].

В данной работе синтез пористого кремния проводился при помощи метода электрохимического травления пластин кремния Si (100) в растворе HF(49%):C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH 1:1 при плотности тока 60 мА/см<sup>2</sup>, структура пористого слоя определяется плотностью тока, концентрацией HF в электролите и стехиометрией образца. Синтез УНТ проводился при помощи пиролитического газофазного осаждения (ПГО): из газовой фазы с летучим катализатором на плоские кремниевые подложки.

Для изучения взаимодействия ионных пучков с наноразмерными структурами, на ускорительном комплексе HVEE-AN500 в НИИЯФ МГУ была проведена серия имплантаций ионов He<sup>+</sup> и Ar<sup>+</sup>. Облучения проводились при комнатной температуре в диапазоне энергий от 50 до 400 кэВ, дозы облучения варьировались от 5\*10<sup>15</sup> до 10<sup>17</sup> ион/см<sup>2</sup>.

В представленной работе приведено сравнение процессов дефектообразования в наноразмерном монокристаллическом и пористом кремнии под действием ионного облучения, исследовано образование дефектов в УНТ под действием ионного облучения. Для изучения модификации структуры образцов были измерены дозовые зависимости интенсивностей линии КР-спектров, по отношению которых можно определить степень аморфизации структур. Для изучения глубины образования дефектов использовались СЭМ-изображения сколов образцов. При помощи метода Резерфордского обратного рассеяния были изучены профили внедренных ионов и примесей, образовавшихся в процессе создания структур. Количество парамагнитных центров определялось с помощью электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Получены дозовые зависимости числа парамагнитных центров, характеризующие дефектообразование в исследованных наноразмерных материалах.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-01040.

**Литература**

1. А.В. Кожемяко, А.П. Евсеев, Ю.В. Балакшин, А.А. Шемухин, Особенности дефектообразования в наноструктурированном кремнии при ионном облучении // ФТП, 2019, том 53, вып. 6.
2. Kushkina K.D, et al. Evolution of the multi-walled carbon nanotubes structure with increasing fluence of He ion irradiation. // Nucl. Inst. Meth. Phys Res Sect B Beam Interact. with Mater. Atoms. 2018. V. 430. P. 11–17.

«IN-SITU» ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЗМОВ ТОКОГЕНЕРИРУЮЩИХ РЕАКЦИЙ  
В АНОДЕ ТВЁРДООКСИДНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА МЕТОДОМ  
СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙЯНИЯ СВЕТА

Елисеева Г.М.

ИФТТ РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия  
E-mail: eliseevagm@issp.ac.ru

Важной задачей в области разработки твёрдооксидных топливных элементов (ТОТЭ) является изучение кинетики процессов окислительно-восстановительных реакций на электродах ТОТЭ. Понимание механизмов протекания токогенерирующих реакций в электродах позволит оптимизировать поляризационную компоненту внутреннего сопротивления ячейки ТОТЭ. Однако применение различных методов исследования сильно ограничено по причине высокой температуры работы ТОТЭ (600-900°C), высоких токовых нагрузок (до 2-3 А/см<sup>2</sup>), наличия агрессивных сред, а также разделённых газовых пространств. Традиционные электрохимические методы исследования ТОТЭ, такие как измерение вольтамперных характеристик (ВАХ), импедансная спектроскопия, хронопотенциометрия предоставляют информацию об элементе в целом и часто основываются на неоднозначных моделях для интерпретации результатов. В свою очередь спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) позволяет проводить неинвазивные дистанционные исследования непосредственно в области протекания токогенерирующей реакции в режиме реального времени.

В ИФТТ РАН была разработана методика, комбинирующая традиционные электрохимические методы исследования с методами КР-спектроскопии. Однако необходимо учесть, что глубина проникновения лазерного излучения, возбуждающего спектр КРС, составляет менее 1 мкм. Поэтому были созданы образцы со специальной геометрией с прозрачным электролитом и катодом торообразной формы для измерения спектров КРС непосредственно из области протекания реакции на границе электролит|анод.

В данной работе представляются результаты исследования влияния токовой нагрузки (рис. 1а) и состава топливной атмосферы (рис. 1б) на зарядовое состояние цезия в аноде ячейки ТОТЭ электролит- и анод- поддерживающей конструкции. Проводится сравнение данных, полученных от образцов обеих конструкций. Показано, что переход к тонкоплёночному электролиту (толщиной менее 10 мкм):

— во-первых, позволяет проводить исследования при пониженных температурах (500-800°C), что положительно сказывается на виде спектров за счёт уменьшения паразитного вклада теплового излучения, а также приводит к замедлению деградации элемента;

— во-вторых, в спектрах КРС уменьшается фоновый вклад от твёрдого электролита;

— в-третьих, за счёт уменьшения внутреннего сопротивления ячейки увеличивает-ся диапазон токовых нагрузок.

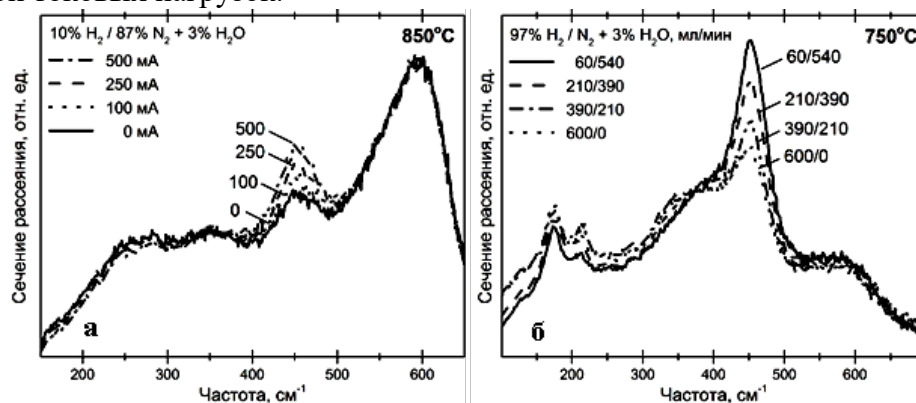


Рис. 1. Влияние токовой нагрузки (а) и состава топливной атмосферы (б) на вид спектров комбинационного рассеяния света для модельных образцов твердооксидных топливных элементов электролит- и анод- поддерживающей конструкции (а и б, соответственно).

Исследования были проведены при поддержке РНФ (грант № 17-79-30071). «Разработка научно обоснованных путей оптимизации мощностных и массогабаритных характеристик батарей ТОТЭ планарной конструкции и создание топливного процессора для высокоэффективных транспортных и стационарных энергоустановок».

## АНИЗОТРОПИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ ВБЛИЗИ $L_{23}$ КРАЕВ ПОГЛОЩЕНИЯ ЦЕРИЯ В МОНОКРИСТАЛЛЕ $\text{CeCoGe}_3$

Еникеев А.И.

*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: aydar0104@gmail.com*

В данной работе изучается анизотропия коэффициента поглощения рентгеновского синхротронного излучения в кристалле  $\text{CeCoGe}_3$ , возникающая при энергиях падающего излучения, близких к  $L$ -краям поглощения церия.  $\text{CeCoGe}_3$  является членом ряда соединений  $\text{CeTX}_3$  ( $T$  = переходный металл,  $X = \text{Si}$  или  $\text{Ge}$ ), которые кристаллизуются в нецентросимметричной тетрагональной структуре типа  $\text{BaNiSn}_3$  (пространственная группа  $I4mm$ ). В кристаллах с такой симметрией при энергиях падающего излучения вблизи краев поглощения возможно наблюдение линейного дихроизма, т.е. различия коэффициентов поглощения двух ортогональных поляризаций излучения. В одноосных кристаллах, к которым относится  $\text{CeCoGe}_3$ , эффект будет наблюдаться, если один вектор поляризации ориентирован вдоль оси симметрии порядка выше 2, а другой – в плоскости, перпендикулярной этой оси. Физическая причина этого явления состоит в том, что волновые функции возбужденного электронного состояния расщеплены низкосимметричным кристаллическим полем. Таким образом, существование линейного дихроизма отражает анизотропию изучаемой системы, а коэффициент поглощения может быть разделен на изотропную  $\sigma(0,0)$  и анизотропную  $\sigma(2,0)$  части. В случае одноосного кристалла существует два зависящих от энергии независимых параметра, определяющих угловую зависимость сечения поглощения, которое можно представить, как сумму изотропной и анизотропной частей [1]:

$$\sigma(e) = \sigma(0,0) - 1/\sqrt{2}(3\cos^2\theta - 1)\sigma(2,0), \quad (1)$$

где  $\theta$  – Угол между главной осью кристалла и вектором поляризации.

В настоящей работе выполнено математическое моделирование спектров поглощения в кристалле  $\text{CeCoGe}_3$  при энергиях, близких к энергиям  $L_2$  –краю (6,164 КэВ) и  $L_3$  –краю (5723.0 КэВ) поглощения, и соответствующих двум ортогональным поляризациям падающей волны. Для расчетов использована программа FDMNES [2], подбор некоторых параметров моделирования выполнен из условия наилучшего соответствия расчетных спектров и экспериментальных спектров, полученных на синхротроне ESRF (Гренобль, Франция). Обработка спектров позволила разделить коэффициент поглощения на изотропную и анизотропную части, т.е. выделить вклад в энергетические спектры, обусловленный анизотропией рентгеновского поглощения и отвечающий за возникновение линейного дихроизма.

Автор выражает благодарность А.Рогалеву за представление экспериментальных данных и Е.Н.Овчинниковой за помощь в обработке спектров.

### Литература

1. Christian Brouder. Angular dependence of x-ray absorption spectra.//J. Phys.: Condens. Matter. 1990, № 2, p.701-738.
2. [http:// www. neel. fr/ fdmnes](http://www.neel.fr/fdmnes)

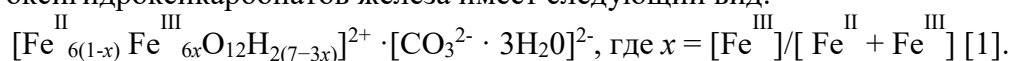
МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОКСИГИДРОКСИКАРБОНАТОВ  
ЖЕЛЕЗА, ОБРАЗОВАВШИХСЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ БИОГЕННОГО  
ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ

Ермолаев Н.А., Грачева М.А., Трифонова В.К., Антонова А.В.

МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

E-mail: 0902nikita@mail.ru

За прошедшее десятилетие появилось большое количество информации, подтверждающей, что в результате биотрансформации минералов железа микроорганизмами, образуются оксигидроксикарбонаты железа [1]. Оксигидроксикарбонаты представляют собой сложные соединения, обладающие слоистой структурой. Общая формула оксигидроксикарбонатов железа имеет следующий вид:



Настоящая работа посвящена мёссбауэровским исследованиям оксигидроксикарбонатов железа, полученных в результате микробиологического синтеза в анаэробных средах в присутствии сидерита, ферригидрита и металлических волокон в минеральной среде.

Мёссбауэровские исследования проводили с использованием источника  $^{57}\text{Co}$  в матрице Rh на спектрометре MS-1104Em, работающем в режиме постоянных ускорений с треугольной формой изменения доплеровской скорости движения источника относительно поглотителя. Измерения проводились при комнатной температуре, а также при температуре 82 К. Для обработки экспериментальных спектров использовалась программа SpectrRelax [2], позволяющая проводить модельную расшифровку мёссбауэровского спектра.

В данной работе были проведены мёссбауэровские исследования контрольных образцов синтезированного ферригидрита и природного сидерита, а также опытных образцов, полученных в результате синтрофного роста *G. ferrihydriticus* и *C. alkalaceticum* в присутствии ферригидрита и сидерита. Кроме того, был исследован образец, полученный в результате роста накопительной культуры, содержащей три формы бактерий таксономически близких к аноксигенным фототрофам рода *Ectothiorodospira* и железоредуцирующим бактериям родов *Geolkalibacter* и *Natronincola* в минеральной среде, в которой присутствовали металлические волокна.

Анализ мёссбауэровских спектров образцов, полученных в результате преобразования ферригидрита, сидерита синтрофной культурой *G. ferrihydriticus*, *C. alkalaceticum*, показал, что формируются два оксигидроксикарбоната железа – требеурденит ( $x = 0,66$ ) и фужерит ( $x = 0,33$ ). В опыте по преобразованию металлических волокон накопительной культурой, состоящей из представителей родов *Ectothiorodospira*, *Geolkalibacter* и *Natronincol*, формируется оксигидроксикарбонат железа с  $x = 0,78$ . Это соединение является смесью требеурденита ( $x = 0,66$ ) и мёссбауэриита ( $x = 1$ ).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00349

### Литература

1. Ona-Nguema G. et al. Iron (II, III) hydroxycarbonate green rust formation and stabilization from lepidocrocite bioreduction // Environmental Science & Technology. – 2002. – Т. 36. – №. 1. – С. 16-20.
2. М.Е. Matsnev and V.S.Rusakov. SpectrRelax: An Application for Mössbauer Spectra Modeling and Fitting // AIP Conference Proceedings, (2012), v.1489

НАСЫЩЕНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ В НЕСФЕРИЧЕСКИХ  
НАНОКРИСТАЛЛАХ Cd(Cu)Se ПРИ СТАЦИОНАРНОМ  
ОДНОФОТОННОМ ВОЗБУЖДЕНИИ ЭКСИТОНОВГолинская А.Д.<sup>1</sup>, Котин П.А.<sup>2</sup>, Жаркова Е.В.<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова,<sup>1</sup> физический факультет,<sup>2</sup> химический факультет, Москва, РоссияE-mail: [and.golinskaya@gmail.com](mailto:and.golinskaya@gmail.com)

Современные методики синтеза позволяют создавать нанокристаллы различной формы, размера и состава. Модификация основных свойств синтезированных соединений традиционно осуществляется путем введения в их структуру ионов переходных и редкоземельных элементов, что при определённых условиях роста приводит к образованию изменённой несферической формы, в частности к тетраподам. Спектры поглощения коллоидных растворов нанокристаллов в форме тетраподов подобны спектрам поглощения сферических КТ такого же размера, однако в спектре поглощения тетраподных наноструктур экситонные пики оказываются более ярко выраженными, вследствие их более высокой степени монодисперсности. К настоящему моменту фундаментальные свойства сферических квантовых точек (КТ) различного состава широко изучены, однако структурные, оптические и электронные свойства несферических легированных нанокристаллов исследованы мало.

Данная работа направлена на выявление и анализ физических явлений, приводящих к изменению оптических свойств несферических Cu-легированных КТ CdSe (CdSe(Cu)) при стационарном однофотонном возбуждении лазерными импульсами. Исследуемые тетраподные CdSe(Cu) КТ синтезированы по методике, аналогичной приведенной в работе [2]; каждая наночастица имеет ядро с гексагональной кристаллической решеткой (кубическая структура) и плечи с кубической решеткой (вюрцит).

Для исследования нелинейно-оптических свойств несферических КТ применена методика лазерной спектроскопии - накачка и зондирование. Возбуждение коллоидного раствора CdSe(Cu) КТ осуществлялось импульсами второй гармоникой Nd<sup>3+</sup>:YAlO<sub>3</sub>-лазера ( $2\hbar\omega$ ,  $\lambda = 540\text{ нм}$ ,  $\tau = 11\text{ нс}$ ), а зондирование - широкополосным излучением фотолюминесценции красителей кумарин-120 и кумарин-7, возбуждаемых третьей гармоникой лазера ( $3\hbar\omega$ ,  $\lambda = 360\text{ нм}$ ). Энергия фотонов второй гармоники лазерного излучения совпадает с энергией возбуждения основного экситонного перехода исследуемых КТ. Таким образом осуществлялось резонансное стационарное однофотонное возбуждение образца. Спектр фотолюминесценции кумарина-120 совпадает с полосой поглощения второго экситонного перехода исследуемого образца (от 420 до 480 нм), а кумарина-7 - с полосой поглощения основного экситонного перехода (от 480 до 600 нм). Исследуемый раствор КТ разведен в неполярном растворителе (гексане) и помещен в кварцевую кювету с длиной оптического пути 1 мм. Все измерения проводились при комнатной температуре.

Спектры линейного и нелинейного поглощения коллоидного раствора CdSe(Cu) КТ представлены на Рис. 1а, а изменение пропускания на длине волны оптических переходов, связанных с различными электронными и дырочными квантовыми состояниями - на Рис. 1б и Рис. 1с, соответственно.

В спектре линейного поглощения коллоидного раствора CdSe(Cu) КТ (Рис. 1а) обнаружены две полосы поглощения, которые связаны с переходами между нижним электронным уровнем и двумя различными дырочными уровнями,  $1S_{3/2}-1S_e$  и  $2S_{3/2}-1S_e$  соответственно [1]. Выявленные спектральные особенности оказываются хорошо различимы при комнатной температуре благодаря малому разбросу размеров тетраподных нанокристаллов, в отличие от КТ другой морфологии. Обнаружено нелинейное изменение пропускания на длинах волн, соответствующих  $1S_{3/2}-1S_e$  и  $2S_{3/2}-1S_e$  экситонным переходам (Рис. 1б и Рис. 1с, соответственно), которое объяснено эффектом заполнения состояний. Показано, что поглощение обоих экситонных переходов насыщается с увеличением интенсивности накачки, при этом, по-видимому, степень просветления экс-



тонных переходов пропорциональна силе осцилляторов исследуемых переходов. Данное явление объяснено эффектом насыщения поглощения при стационарном однофотонном возбуждении экситонов.

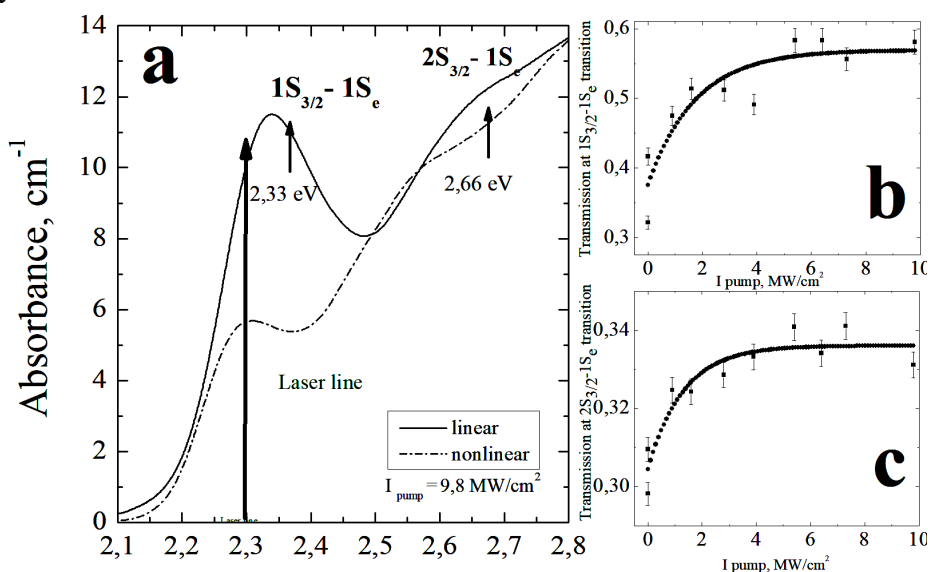


Рис.1. а) Спектр линейного и нелинейного поглощения коллоидного раствора Cd(Cu)Se КТ при интенсивности накачки  $9,8 \text{ МВт/см}^2$ . б), с) Изменение пропускания на длине волны  $1S_{3/2}-1S_e$  и  $2S_{3/2}-1S_e$  перехода в зависимости от интенсивности накачки, соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (РНФ), грант № 18-72-00075.

### Литература

1. A. I. Ekimov, F. Hache, M. C. Schanne-Klein, D. Ricard, C. Flytzanis, I. A. Kudryavtsev, T. V. Yazeva, A. V. Rodina, Al. L. Efros. Absorption and intensity-dependent photoluminescence measurements on CdSe quantum dots: assignment of the first electronic transitions // Journal of the Optical Society of America B. 1993, Vol. 10(1), p. 100-107.
2. P. A. Kotin, S. S. Bubenov, N. E. Mordvinova, S. G. Dorofeev. AgCl-doped CdSe quantum dots with near-IR photoluminescence // Beilstein Journal of Nanotechnology. 2017, №8, p. 1156–1166.

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ КРИСТАЛЛА МОЛИБДЕНА ГАЗОВЫМИ КЛАСТЕРНЫМИ ИОНАМИ АРГОНА И РАСЧЁТ УГЛОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ДЛЯ РАСПЫЛЁННЫХ АТОМОВ

Завильгельский А.Д., Назаров А.В.

МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

E-mail: zavilgelsky.ad15@physics.msu.ru

Работа посвящена моделированию взаимодействия газовых кластерных ионов с твёрдым телом. Кластерные ионы представляют из себя ансамбль от нескольких единиц до десятков тысяч атомов, связанных силами Ван-дер-Ваальса. Газовые кластеры обычно образуются при адиабатическом расширении газа через сверхзвуковое сопло, а затем ионизируются электронным ударом. В отличие от одиночных ионов (мономеров), для кластерных ионов характерны неглубокое проникновение в образец, низкая энергия в расчёте на один ион, выделение энергии взаимодействия в малом объёме вещества.

Кластерные ионы применяются для полировки и очистки поверхностей, планаризации слоёв в процессе производства микроэлектроники, обработки биомедицинских изделий, метода вторичной ионной масс-спектрометрии для анализа органических соединений.

Наилучшим методом, позволяющим моделировать процессы, происходящие при бомбардировке твёрдых тел кластерными ионами, является метод молекулярной динамики (МД). Он основан на численном интегрировании уравнений движения частиц системы. Для описания взаимодействия между атомами используются потенциалы, различные для частиц разного сорта.

Расчёты проводились с помощью программы PARCAS. Было произведено моделирование процессов соударения кластерных ионов аргона с мишенью из молибдена. Кластерные ионы падают на мишень по нормали, энергия одного кластера – 10 кэВ, мишень находится при температуре 300 К. Размер кластера – от 50 до 2000 атомов.

Проведена серия расчётов, содержащая 2000 актов соударения кластера аргона с кристаллом молибдена. Изучены зависимости для угловых распределений коэффициента распыления от дозы с учётом эволюции поверхности в процессе облучения. Для фиксированных доз был произведён анализ рельефа поверхности. Графики углового распределения распылённых атомов мишени представлены на рис. 1.

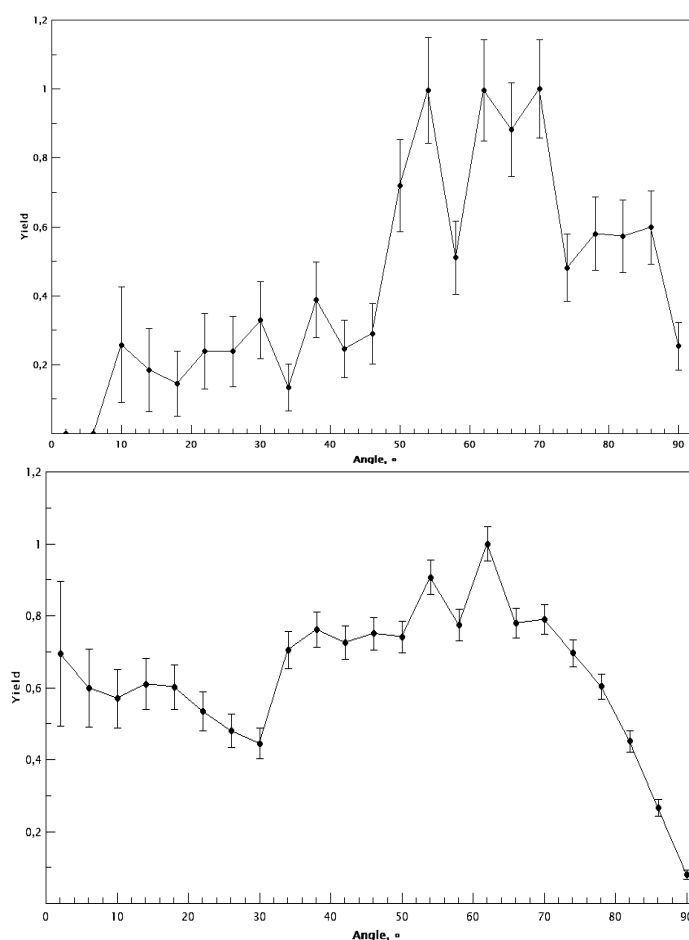


Рис.1. *a* — Угловое распределение для почти невозмущённой поверхности (10 соударений, среднеквадратичная шероховатость порядка 1 ангстрем); *б* — Угловое распределение при достаточно большой дозе попавших кластеров (1500 соударений, среднеквадратичная шероховатость 6,73 ангстрем).

Показано, что выход атомов под малыми углами к нормали поверхности наблюдается для шероховатой поверхности. Обсуждаются механизмы, приводящие к данной зависимости.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00725.

### Литература

1. Nazarov A.V., Chernysh V.S., Nordlund K., Djurabekova F., Zhao J. Spatial distribution of particles sputtered from single crystals by gas cluster ions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Elsevier BV (Netherlands), 2017. № 406, Part B, с. 518-522.

2. Назаров А.В., Черныш В.С., Ермаков Ю.А., Шемухин А.А. Угловые распределения атомов молибдена, распылённых с помощью пучка газовых кластерных ионов аргона // Прикладная физика, 2016. № 6, с. 5-8.

## РАСЧЕТ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ Si, C И 3C-SiC МЕТОДОМ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА

Абдулвагабов М.Ш., Загиров М.Ю.

*ДГУ, Махачкала, Россия*

*E-mail: zaghirov@mail.ru*

Одним из успешных методов описания электронных свойств кристаллов является метод полуэмпирического псевдопотенциала. Для расчета зонной структуры сначала решается задача на собственные значения одноэлектронного псевдогамильтониана без учета спиноорбитального взаимодействия. Для этого мы использовали модификацию Brust'a метода возмущений Lowdin'a [1]. Полученные таким образом собственные функции были использованы для формирования новых пробных функций, которые были применены для решения задачи на собственные значения гамильтониана со спиноорбитальным взаимодействием согласно методу [2]. В нашем случае задача на собственные значения псевдогамильтониана со спиноорбитальным взаимодействием

$$H = H_0 + W_{so}$$

сводится к решению следующего секулярного уравнения

$$\det[\langle \psi_k^{n,v} | H_0 + W_{so} | \psi_k^{m,v'} \rangle - \epsilon(k) \langle \psi_k^{n,v} | \psi_k^{m,v'} \rangle] = 0,$$

$$(n, m = 1, 2, \dots, N_0; v, v' = -1/2, +1/2)$$

Расчет секулярного уравнения выполнен в 1/48 части зоны Бриллюэна. Результаты расчета зонной структуры полупроводников Si, C и 3C-SiC хорошо согласуются с экспериментальными данными.

### Литература

1. D.R. Masovic and F. Vukajlovic, Comput. Phys. Commun. 24 (1981) 181.
2. G.C. Fletcher, The Electron Band Theory of Solids (North-Holland, Amsterdam-London, 1971) p. 34.

## КВАНТО МЕХАНИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ LaScO<sub>3</sub> В РАМКАХ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Зафари У.

*ЦИРНИТ АН РТ, Душанбе, Таджикистан*

*E-mail: zafari\_umar@mail.ru*

Перовскитоподобные кристаллы типа ABO<sub>3</sub> интересны в связи с возможностями практического применения этих материалов для создания на их основе топливных элементов, газовых сенсоров, устройств для хранения информации, приборов и т. д. [1-3].

В настоящей работе представлены результаты кванто - механических расчетов электронного строения орторомбического (*Pbnm#62*) кристалла LaScO<sub>3</sub>, с использованием три различные схемы расчета обменно-корреляционного потенциала: приближение локальной плотности (GGA), модифицированный метод Бекке Джонсона (mBJ) и mBJ+U учитывающее сильные электронные корреляции 3d-электронами атомов Sc.

Расчеты электронной структуры проводились модифицированным методом (линеаризованных) присоединенных плоских волн (L)APW+lo с помощью программного па-

кета WIEN2k. На рис. 1. приведены результаты электронная плотность GGA –расчеты для исследуемого объекта.

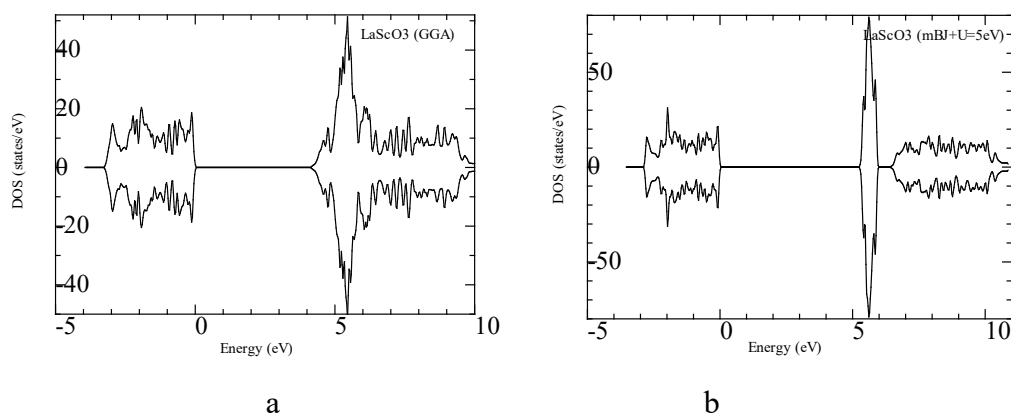


Рис.1. Плотность электронных состояний LaScO<sub>3</sub>, GGA (a), mBJ+U (U=5eV).

В рамках mBJ+U приближения, для сильно коррелированных  $3d$  электронов атома Sc расчеты проводятся со следующими значениями параметра  $U$ :  $U=1\text{eV}$ ,  $U=2\text{eV}$ ,  $U=3\text{eV}$ ,  $U=4\text{eV}$  и  $U=5\text{eV}$ , последовательно. Значение запрещенной щели при всех значениях параметра  $U$  приведено в таблице 1.

Таблица 1.

System	GGA	mBJ	mBJ+U (U=1eV)	mBJ+U (U=2eV)	mBJ+U (U=3eV)	mBJ+U (U=4eV)	mBJ+U (U=5V)
LaScO <sub>3</sub>	4.08	4.93	5.004	5.08	5.12	5.16	5.20

Таким образом, в рамках настоящей работы исследованы электронной структуры LaScO<sub>3</sub> с использованием три различных схем расчета: GGA, mBJ и mBJ+U. Установлено, что учесть параметр Хаббард -  $U$  приводит к расширению запрещенной щели.

### Литература

1. Ma C. G., Krasnenko V., Brik M.G. First-principles calculations of different (001) surface terminations of three cubic perovskites CsCaBr<sub>3</sub>, CsGeBr<sub>3</sub>, and CsSnBr<sub>3</sub>//Journal of Physics and Chemistry of Solids 115 (2018), p- 289–299.
2. Paromita Dutta., Sohan Lal and Sudhir K. Pandey Paromita Dutta. Studying the occupied and unoccupied electronic structure of LaCoO<sub>3</sub> by using DFT+embedded DMFT method with the calculated value of  $U$ //arXiv:1711.03812v1 [cond-mat.str-el] 10 Nov - 2017, p-1-7.
3. Kim M. M. S. Kim C. H. Park. Calculation of the Electronic Structure of Cubic Perovskite SrTiO<sub>3</sub> //Journal of the Korean Physical Society, Vol. 56, No. 1, January 2010, p. 490-493.

## ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭВОЛЮЦИИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ КУБИЧЕСКОГО ТИТАНА В ПРОЦЕССЕ РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ТЕОРИИ УПРУГИХ ИСКАЖЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Иванов И.В.

НГТУ, Новосибирск, Россия  
E-mail: [i.ivanov@corp.nstu.ru](mailto:i.ivanov@corp.nstu.ru)

Согласно современным представлениями о физике прочности и пластичности металлов, их существенное упрочнение при пластической деформации обусловлено значительным повышением концентрации дефектов, в первую очередь - повышением числа дислокаций [1, 2].

Наиболее распространенным и убедительным методом анализа дислокационной структуры титановых сплавов является просвечивающая электронная микроскопия.

Однако существуют некоторые альтернативные способы исследования кристаллической структуры, основанные на методах рентгеновской дифракции. Хорошо известные методы Вильямсона-Холла и Варрен-Авербаха позволяют оценить такие параметры микроструктуры, как размер областей когерентного рассеяния (ОКР) и величину негомогенных искажений кристаллической решетки. Впоследствии, для анализа упруго анизотропных твердых тел методы Вильямсона-Холла и Уоррена-Авербаха были существенно модифицированы.

В данной работе используются методы рентгеновской дифракции для анализа эволюции дислокационной структуры  $\beta$  титана в процессе рекристаллизации.

В ходе работы был подробно исследован кристаллизационный процесс кубического  $\beta$ -титана, состава Ti45Nb. Согласно классическим представлениям, а также полученным результатам (Рис. 1 и Рис. 2), в процессе рекристаллизации можно выделить три основных стадии: стадию возврата, стадию первичной рекристаллизации и стадию собирательной рекристаллизации. Кроме того, видно, что на стадии возврата материал также претерпевает структурные превращения, приводящие к росту числа дислокаций, а также уменьшению размеров ОКР. Авторы связывают данное явление с появлением термических напряжений в результате нагрева.

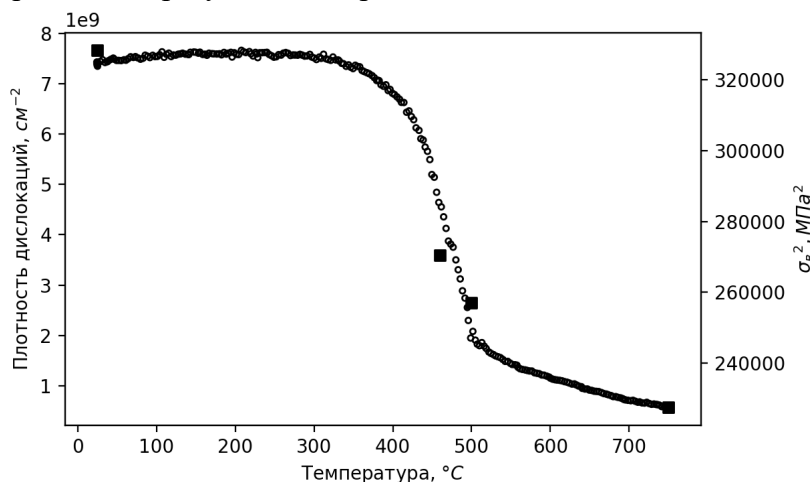


Рис.1. Изменение плотности дислокаций Ti45Nb в процессе рекристаллизации.

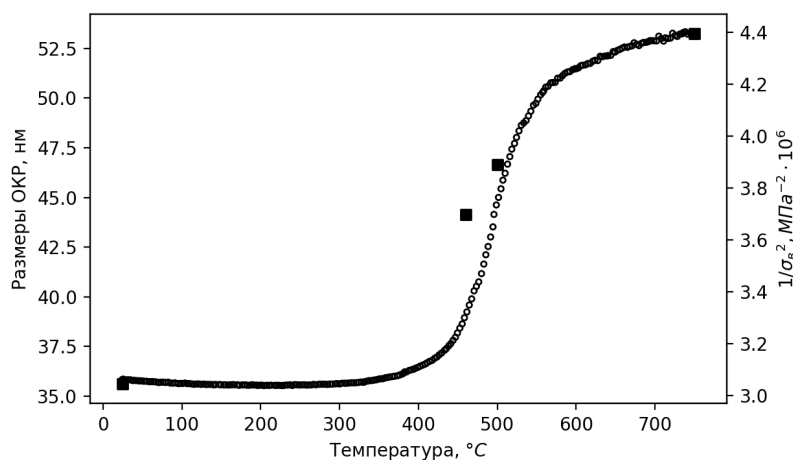


Рис.2. Изменение размеров ОКР Ti45Nb в процессе рекристаллизации.

Согласно дислокационной теории конструктивной прочности основной причиной повышения предела прочности ( $\sigma_B$ ) однофазных гомогенных материалов при их пластической деформации являются напряжения возникающие за счет повышения количества дислокаций, а также напряжения, вызванные структурными барьерами в виде границ составных единиц материала. Зависимость напряжений от числа дислокаций

упрощенно описывается законом Тейлора  $\sqrt{\sigma_D} = \alpha G \sqrt{\rho}$ , где  $\alpha$  - постоянная;  $G$  – модуль сдвига,  $\rho$  - плотность дислокаций. В свою очередь зависимость напряжений от размеров кристаллитов описывается согласно закону Холла-Петча  $\sqrt{\sigma_{ХП}} = K/\sqrt{D}$ , где  $K$  – постоянная;  $D$  – размеры кристаллитов (в данном случае размеры ОКР). Используя данные зависимости были сопоставлены полученные значения пределов прочности Ti45Nb при различной температуре с рассчитанными структурными параметра.

Согласно Рис. 1 и Рис. 2 динамика структурных превращений полностью соответствуют классическим представлениям, касающихся изменений предела прочности в процессе рекристаллизации материалов.

### Литература

1. Kittel, P. McEuen, P. McEuen: Introduction to solid state physics. Wiley New York. 1996.
2. Friedel J.: Dislocations: International Series of Monographs on Solid State Physics. Elsevier. 2013.

## ВЫСОКОПОЛЕВЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАМАГНИЧЕННОСТИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

Иванов Л.А.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: la.ivanov@physics.msu.ru*

Известно, что фундаментальные характеристики  $R_2Fe_{14}B$  очень чувствительны к атомам замещения и атомам внедрения [1]. В настоящей работе изучено совместное влияние частичного замещения атомов Ho, Er и Tm на Nd в соединениях  $R_2Fe_{14}B$  ( $R=Ho, Er, Tm$ ) и поглощение водорода на поведение намагниченности в магнитных полях до 60 Тл.

Образцы были получены методом Чохральского. Метод Лауэ показал, что получить монокристаллические образцы не удалось. Рентгеноструктурные исследования проводились на порошковых образцах с помощью дифрактометра высокого разрешения «Empyrean» в медном фильтрованном излучении методом сканирования с шагом  $0,013^\circ$  при комнатной температуре. Обработка и расчет параметров проводились с помощью программного комплекса HighScore Plus 4.1.

Гидрирование образцов  $(Ho_{0,5}Nd_{0,5})_2Fe_{14}B$ ,  $(Tm_{0,5}Nd_{0,5})_2Fe_{14}B$ ,  $(Er_{0,5}Nd_{0,5})_2Fe_{14}B$  было проведено прямой реакцией исходных материалов с газом  $H_2$  высокой чистоты, полученным разложением  $LaNi_5H_x$  (Институт низких температур и структурных исследований Польской академии наук, г. Вроцлав, Польша). Кристаллическая структура полученных гидридов также была изучена с помощью рентгеноструктурного анализа. В таблице ниже приведены результаты данного анализа изученных в этой работе соединений.

Соединение	a, нм	c, нм	c/a	V, нм <sup>3</sup>	$\Delta V/V$
$(Ho_{0,5}Nd_{0,5})_2Fe_{14}B$	0,8776	1,2098	1,3785	0,932	-
$(Tm_{0,5}Nd_{0,5})_2Fe_{14}B$	0,8764	1,2055	1,3755	0,926	-
$(Er_{0,5}Nd_{0,5})_2Fe_{14}B$	0,8771	1,2061	1,3751	0,928	-
$(Ho_{0,5}Nd_{0,5})_2Fe_{14}BH_{5,5}$	0,8881	1,2206	1,3744	0,963	3,4
$(Tm_{0,5}Nd_{0,5})_2Fe_{14}BH_{5,5}$	0,8869	1,2163	1,3710	0,957	3,3
$(Er_{0,5}Nd_{0,5})_2Fe_{14}BH_{5,5}$	0,8876	1,2169	1,3711	0,959	3,3

Исследования магнитных свойств проводились на свободных порошковых образцах при температуре кипения жидкого гелия. Измерения намагниченности в высоких импульсных полях до 60 Тл проводились на специальном оборудовании в лаборатории высоких магнитных полей (Дрезден, Германия). Абсолютные значения намагниченности были откалиброваны с помощью магнитных измерений в статических полях на стандартном магнетометре PPMS-14 (Quantum Design, США) в полях до 14 Тл.

На рис. 1 представлены результаты измерения намагниченности для соединений  $\text{Ho}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ,  $(\text{Ho}_{0,5}\text{Nd}_{0,5})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ,  $(\text{Ho}_{0,5}\text{Nd}_{0,5})_2\text{Fe}_{14}\text{BH}_{5,5}$ . Из рисунка видно, что при замещении половины атомов Ho атомами Nd намагниченность и первое критическое поле перехода  $\mu_0 H_{cr1}$  возрастает в 2 раза.

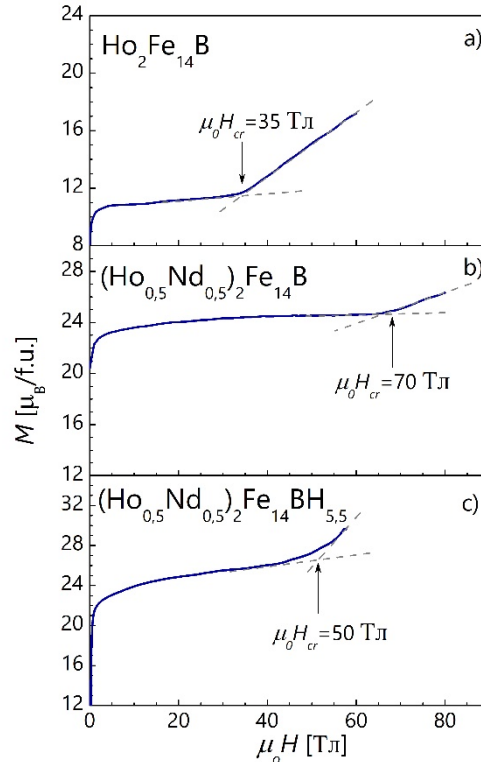


Рис.1. График зависимости намагниченности от величины поля при температуре 4,2 К для: (a) –  $\text{Ho}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ; (b) –  $(\text{Ho}_{0,5}\text{Nd}_{0,5})_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  и (c) –  $(\text{Ho}_{0,5}\text{Nd}_{0,5})_2\text{Fe}_{14}\text{BH}_{5,5}$ .

По величине первого критического поля может быть определен обменный параметр  $\lambda$  с помощью формул

$$H_{cr1} = \lambda(M_{Fe} - 2 \cdot M_{Ho}), \quad (1)$$

$$H_{cr1} = \lambda(M_{Fe} - M_{Ho} \cdot \xi), \quad (2)$$

где  $M_{Fe}$  и  $M_{Ho}$  – намагниченности железной и гольмиевой подрешетки, соответственно;  $\xi = 1/(1 + \lambda_{Nd}\chi_{Nd})$ , где  $\lambda$  – обменный параметр и  $\chi$  – восприимчивость. После гидрирования величина  $\mu_0 H_{cr1}$  уменьшается до значения 50 Тл. По оценкам авторов работы [2] сила межподрешеточного обмена Ho-Fe в гидриде снижается на 35%. Это позволяет наблюдать явление индуцированного внешним магнитным полем ферромагнитного состояния в гидридах, где атомы Tm замещаются атомами Nd.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-13-00135). Автор выражает благодарность д.ф.-м.н. И.С. Терёшиной за руководство и оказанную помощь в работе.

### Литература

1. J. F. Herbst.  $\text{R}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  materials: Intrinsic properties and technological aspects // Reviews of Modern Physics. 1991. Vol. 63 (4). P. 819-898.

2. Tereshina I.S., Pyatakov A.P., Tereshina-Chitrova E.A., Gorbunov D.I., Skourski Yu, Law J.M., Paukov M.A., Havela L., Doerr M., Zvezdin A.K., Andreev A.V. Probing the exchange coupling in the complex modified Ho-Fe-B compounds by high-field magnetization measurements // AIP advances. 2018. Vol. 8 (12), P. 125223.

## ВЛИЯНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНОГО СОДЕРЖАНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КОМПОНЕНТ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И СУБСТРУКТУРУ НАНОКОМПОЗИТОВ $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$

Ивков С.А.<sup>1</sup>, Домашевская Э.П.<sup>1</sup>, Ситников А.В.<sup>2</sup>,  
Стогней О.В.<sup>2</sup>, Козаков А.Т.<sup>3</sup>, Никольский А.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ВГУ, физический факультет, Воронеж, Россия

<sup>2</sup>ВГТУ, Воронеж, Россия

<sup>3</sup>ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: fit@phys.vsu.ru

Наногранулированные композиты d-металл-диэлектрик вызывают интерес благодаря наличию таких свойств, как гигантское магнетосопротивление, аномальный эффект Холла и других.

Исследуемые нами гетерогенные пленочные нанокompозиты разного состава  $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ , были получены ионно-лучевым распылением составной мишени на стеклянную и ситалловую подложку. Мишень представляла собой металлическую пластину CoFeZr с расположенными на её поверхности пластинами диэлектрика MgF<sub>2</sub> одинакового размера, но на различном расстоянии друг от друга. Это позволяло напылять нанокompозиты с разным процентным соотношением металлической и диэлектрической компонент. Исследуемые образцы были исследованы методом рентгеновской дифракции (РД) на дифрактометре ДРОН-4 и на рентгеновском фотоэлектронном микрозонде ESCALAB 250 получены рентгеновские фотоэлектронные спектры (РФЭС) основных уровней Co2p, Fe2p, Mg1s, F1s, O1s, Zr3d спектры.

Результаты РД показали, что с увеличением содержания в композите металлической компоненты CoFeZr ( $x \geq 25$ ) в композитах  $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$  формируются нанокристаллы CoFeZr на основе структуры кобальта гексагональной сингонии с преимущественной ориентацией [100]. При дальнейшем увеличении содержания металлической компоненты ( $x \geq 38$ ) происходит изменение кристаллической структуры, и нанокристаллы формируются уже на основе кубической ОЦК фазы  $\alpha$ -Fe.

С другой стороны, при большом содержании диэлектрической компоненты MgF<sub>2</sub> в композите происходит формирование нанокристаллической фазы фторида магния (Рис.1). Таким образом, та фаза, относительное содержание которой в составе композита преобладает, образует нанокристаллы, независимо от того, является ли она металлической или диэлектрической.

С помощью рентгеновского фотоэлектронного микрозонда более детально показана общая картина связей металл-диэлектрик в композитах  $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ . На рис. 2 приведены обзорные рентгеновские фотоэлектронные спектры, из которых видно качественное согласие между данными РФЭС и рентгеновского микроанализа: с увеличением содержания металлической компоненты (равному номеру образца), пропорционально увеличивается интенсивность линий Co 2p, Fe 2p и Zr 3d и уменьшается интенсивность линий магния и фтора. Тонкая структура спектров Co 2p, Fe 2p, Zr 3d связей атомов металлов с атомами фтора не обнаружила. Однако небольшое отклонение спектров F1s от гауссовой формы может быть связано с крайне небольшим количеством d-металлов, связанных со фтором.



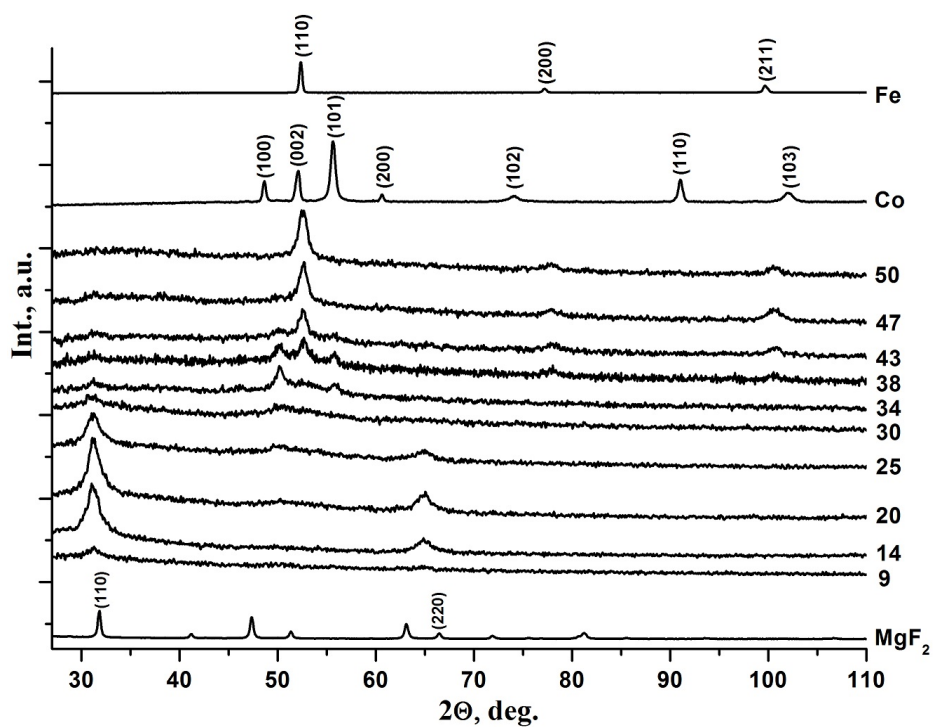


Рис 1. Дифрактограммы образцов  $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ . Цифры в правой стороне рисунка указывают на процентное содержание металлической составляющей композита.

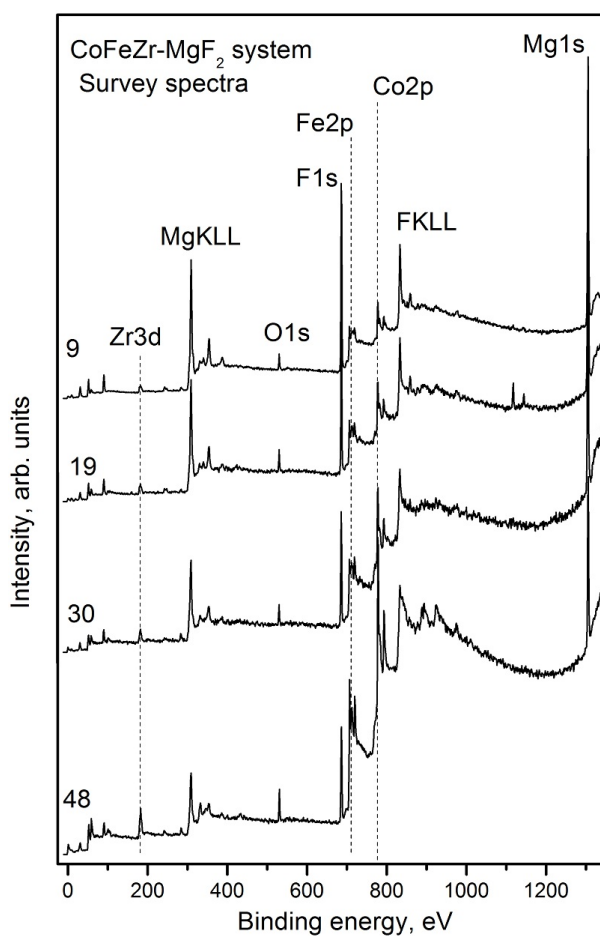


Рис.2. Обзорные спектры с поверхности образцов  $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ . Цифры в левой стороне рисунка указывают на процентное содержание металлической составляющей композита.

ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА  $TlInS_2$  И  $TlInSe_2$   
ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Ismayilova N.A.

*Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

*E-mail: ismayilova\_narmin\_84@mail.ru*

Кристаллы  $TlInS_2$  и  $TlInSe_2$  являются типичными представителями большой группы тройных полупроводниковых соединений типа  $A^{III}B^{III}C^{VI}_2$  следовательно с ярко выраженной слоистой и цепочечной структурой. Проведенные расчеты в работе [1] с использованием нелокальных ионных псевдопотенциалов, показали, что  $TlInSe_2$  представляет собой полупроводник с прямой щелью  $E_g = 0,6\text{эВ}$  которая не соответствует с экспериментальными данными  $E_g = 1,2\text{эВ}$  [2]. Но для соединения  $TlInS_2$  в научной литературе не встречаются теоретических исследований электронного спектра.

В представленной работе расчеты проводились из первых принципов на основе теории функционала плотности (DFT) с использованием метода псевдопотенциала, реализованного в пакете программ Atomistix Tool Kit [3]. В наших расчетах для  $TlInSe_2$  обменно-корреляционное взаимодействие описывалось в приближении обобщенного градиентного приближения (GGA) [4] (LDA+U для  $TlInS_2$ ), обменно-корреляционным функционалом был выбран BLYP [5] (PZ [6] для  $TlInS_2$ ) и в качестве псевдопотенциала использовался HGH(d)[7] (FHI для  $TlInS_2$ ) сохраняющие нормы псевдопотенциал. Рассчитанные зонные структуры вдоль высоко симметричных направлений зоны Бриллюэна представлены для  $TlInSe_2$  и  $TlInS_2$  кристаллов соответственно на рис.1. и на рис.2. Кристаллы являются прямыми полупроводниками с потолком валентной зоны и дном зоны проводимости в точке  $T$  и  $\Gamma$  зоны Бриллюэна соответственно для  $TlInSe_2$  и  $TlInS_2$ .

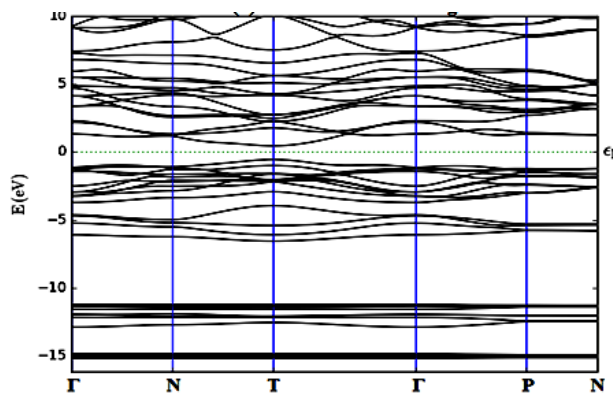


Рис.1. зонная структура  $TlInSe_2$ .

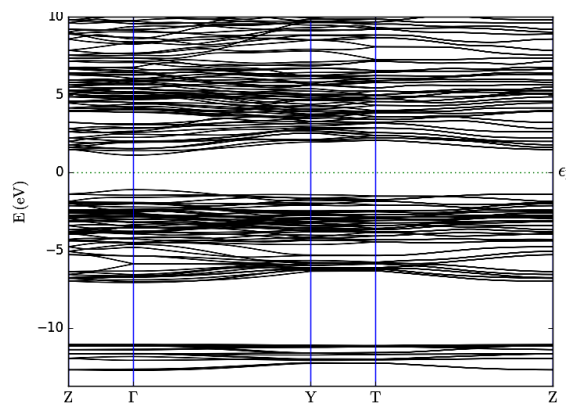


Рис.2. зонная структура  $TlInS_2$ .

Рассчитанная ширина запрещенной зоны  $E_g = 1,02\text{ эВ}$  ( $TlInSe_2$ ) и  $E_g = 2,2\text{ эВ}$  ( $TlInS_2$ ) находятся в хорошем согласии с экспериментальным значением  $1,2\text{ эВ}$  ( $TlInSe_2$ ) [4],  $2,2\text{ эВ}$  ( $TlInS_2$ ) [8].

### Литература

1. Orudzhev G., Mamedov N., Uchiki H, Yamamoto N. et al. J. of Physics and Chemistry of Solids, **64**, 1703-1706, (2003).
2. В.И. Тагиров, А.Э. Бахышов, М.А. Собеих и др. Фотопроводимость и люминесценция  $TlInSe_2$  // Известия Вузов СССР Физика, No.11, (1978), с.131-132.
3. <http://quantumwise.com/>
4. J. Perdew, K. Burk, Y. Wang, Phys. Rev. **B 54**, 16533 (1996)
5. C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, Phys. Rev. **B 37**, 785 (1988)
6. J. Perdew and A. Zunger Phys. Rev., **23** (1981), p.5048-5078.
7. C. Hartwigsen, S. Goedecker, J. Hutter, Phys. Rev., **B 58** (1998), p.3641-3662.
8. Y. Shim, W. Okada, N. Mamedov Thin Solid Films, 509 (2006), p.137 – 140.

## ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОВОЛНОВОГО НАГРЕВА КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Калганов Д.А., Анзулевич А.П.

*ЧелГУ, физический факультет, Челябинск, Россия*

*E-mail: kalganov@csu.ru*

В данной работе исследован процесс микроволнового нагрева композитного материала, представляющего собой смесь железной руды (преимущественно  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), углеродсодержащего порошка (лигнин) и связующего вещества (бентонит). Изучение механизмов взаимовлияния электродинамических и термохимических процессов в таком материале необходимо для решения проблемы оптимизации технологий восстановления оксидов в производстве чистого железа.

В исходном материале при нагреве в инертной атмосфере происходит ряд химических превращений, связанных с процессами дегидратации, взаимодействия компонентов связующего и железной руды с образованием примесных фаз, таких как оливин ( $\text{Mg}_x\text{Fe}_{2-x}\text{SiO}_4$ ) и процессами восстановления железа при окислении углерода ( $\text{CO}/\text{CO}_2$ ). Для расчёта свойств материала на разных стадиях использовали приближение эффективной среды. Значения эффективных диэлектрической  $\epsilon_{eff}$  и магнитной  $\mu_{eff}$  проницаемостей были получены исходя из формулы Бруггемана для модели материала, состоящего из смеси трёх типов частиц:

$$(1 - p_m - p_c - p_b) \frac{\epsilon_g - \epsilon_{eff}}{\epsilon_g + 2\epsilon_{eff}} + p_m \frac{\epsilon_m - \epsilon_{eff}}{\epsilon_m + 2\epsilon_{eff}} + p_c \frac{\epsilon_c - \epsilon_{eff}}{\epsilon_c + 2\epsilon_{eff}} + p_b \frac{\epsilon_b - \epsilon_{eff}}{\epsilon_b + 2\epsilon_{eff}} = 0,$$

где параметры частиц оксида железа:  $\epsilon_m$ ,  $\mu_m$ , углерода:  $\epsilon_c$ ,  $\mu_c = 1$ , бентонита:  $\epsilon_b$ ,  $\mu_b = 1$  и воздушного зазора между частицами  $\epsilon_g = 1$ ,  $\mu_g = 1$ , объёмные доли: бентонита  $p_b = 0,023$  и лигнина  $p_c = 0,9 - p_b - p_m$  [1]. Результаты расчётов для свойств исходного материала при комнатной температуре в зависимости от объёмной доли  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  приведены на рисунке 1, а – б. С учётом полученных данных, методом конечных элементов было проведено моделирование нагрева образцов исследуемого материала в виде гранулы (рис. 1, в).

Полученные данные позволяют решать задачу оптимизации проникновения микроволнового излучения в образцы исследуемого материала и провести качественное сравнение расчетных и экспериментальных временных зависимостей их нагрева, при заданном распределении поля.

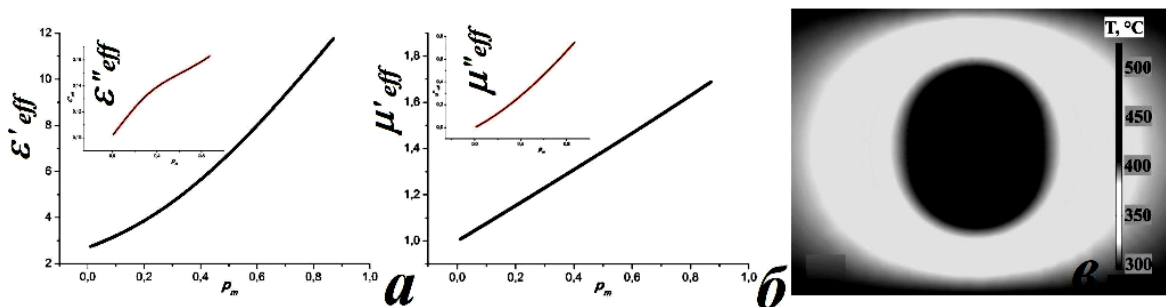


Рис. 1. Рассчитанные свойства исходного материала – а и б, распределение температуры в модели гранулы – в

### Литература

1. L. Ye, Z. Peng, L. Wang, A. Anzulevich, I. Bychkov, H. Tang, M. Rao, Y. Zhang, G. Li, T. Jiang Preparation of core-shell iron ore-biochar composite pellets for microwave reduction // Powder Technology. 2018, V. 338. p. 365-375.

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ  
ТИТАНОВЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ  
МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Кашуркин Е.В.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: ev.kashurkin@physics.msu.ru*

В настоящее время одной из актуальных задач является создание высокопрочных покрытий и исследование их функциональных характеристик, что связано как с потребностью создания материалов (покрытий) с заданными свойствами, так и с рекомендациями по увеличению ресурса работы таких систем. Решение этих задач неразрывно связано со структурными исследованиями, поскольку именно структурные характеристики определяют практически все важнейшие физические и эксплуатационные свойства покрытий. Особое место среди большого числа современных методов исследования реальной структуры материалов занимают рентгеноструктурные, позволяющие неразрушающим способом получить информацию о структуре и фазовом состоянии покрытий.

В работе были проведены исследования атомно-кристаллической структуры, фазового состава, микромеханических и трибологических свойств титановых покрытий, полученных методами магнетронного распыления в атмосферах различного состава (содержание ацетилена в смеси ацетилен-азот варьировалось от 80 до 20 об. %).

Фазовый состав и структуру покрытий изучали методом рентгеновской дифракции в  $\theta$ - $\theta$  геометрии с помощью дифрактометра ARL X'TRA, оснащённого энергодисперсионным детектором, использующим эффект Пельтье.

Результаты по определению фазового и химического состава покрытий представлены в таблице.

№ образца	Состав газовой смеси, об. %		Установленный химический состав покрытия, ат. %				Установленный фазовый состав покрытий
	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	[Ti]	[C]	[N]	[O]	
1 (X9)	80	20	13,4	86,6	–	–	TiN + (TiO <sub>1,20</sub> ) <sub>3,12</sub>
2 (X7)	60	40	29,5	5,2	65,3	–	TiO + Ti N
3 (X6)	40	60	23,1	3,5	43,5	30,0	Ti <sub>3</sub> O <sub>5</sub> + TiO <sub>0,34</sub> N <sub>0,74</sub>
4 (X8)	20	80	28,8	–	34,5	36,7	TiO+TiN+ $\beta$ -C <sub>3</sub> N <sub>4</sub>

Данные по химическому составу покрытий показывают, что из всех синтезированных покрытий к чисто углеродным может быть отнесено лишь покрытие 1, полученное в богатой углеводородом атмосфере с 80 об. % ацетилена. Видно, что при уменьшении доли ацетилена в смеси при напылении покрытий начинает преобладать фаза нитрида титана, а при дальнейшем увеличении объемного содержания азота к ней добавляется фаза оксида титана, а поскольку содержание титана в покрытии остается достаточно низким, то, по-видимому, появляется фаза «мягкого» оксида TiO<sub>2</sub>, обладающего антифрикционными свойствами.

Исследование микромеханических свойств проводили методом измерительного наноиндентирования на нанотвердомере ННТ фирмы CSM International (Швейцария). Индентором служила алмазная пирамида Виккерса. Измерения нанотвердости и модуля упругости были выполнены по стандартной методике Оливера-Фарра (измерения проводили по 9 точкам).

Результаты измерений нанотвердости представлены на рис. 1, из которого видно, что нанотвердость исследованных покрытий составляет от 10 до 20 ГПа и меняется немонотонно с изменением состава смеси реакционных газов: она минимальна при со-

держании ацетилен, равном 80 об. %, и вновь снижается у покрытий, содержащих лишь 20 об. % его.

Результаты трибологических исследований покрытий приведены на рис. 2.

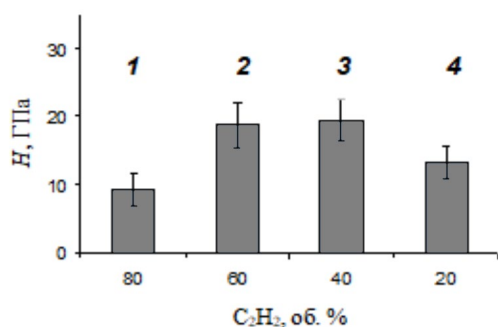


Рис. 1. Результаты измерения нанотвердости. (1) – 80 об.% C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>; (2) – 60 об.% C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>; (3) – 40 об.% C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>; (4) – 20 об.% C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>.

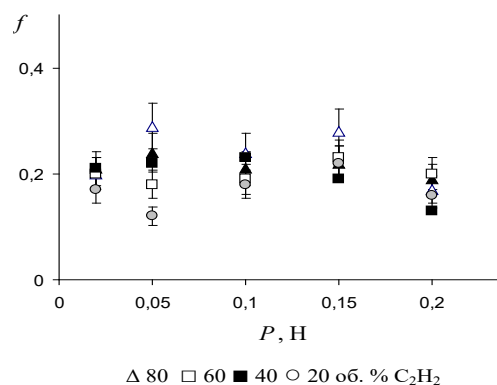


Рис. 2. Зависимость коэффициента трения  $f$  от приложенной нагрузки  $P$ .

Видно, что все исследованные покрытия сохраняют работоспособность во всём диапазоне нагрузок, используемых при испытаниях на фрикционную усталость в течение всего цикла испытаний ( $N > 6000$  циклов), что существенно выше результатов испытания материала стальной подложки (на которую они были нанесены), полученных при высоких контактных давлениях выше  $\sim 300$  МПа.

Коэффициент трения покрытий оказался достаточно низким,  $f \sim 0.2-0.3$ , хотя и был выше, чем у алмазоподобных покрытий, легированных хромом [1-2].

Таким образом, проведённые исследования показали, что данные покрытия могут представлять интерес для дальнейшего их практического использования.

### Литература

1. Левин И.С., Хрущов М.М., Авдюхина В.М., Шальнов С.А., Марченко Е.А., Петржик М.И. // Ученые записки физического факультета МГУ, 2016, № 3, с. 163503.
2. Левин И.С., Хрущов М.М., Марченко Е.А., Авдюхина В.М. // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия, 2016, № 2, с. 46.

## РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ ИЗ КВАНТОВЫХ ЯМ GaAs/AlGaAs ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В p-i-n ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТАХ

Клеммер П.С.

НИТУ «МИСиС», кафедра теоретической физики, Москва, Россия  
E-mail: pavel.klemmer@mail.ru

Введение структур из квантовых ям в активную область p-i-n фотовольтаических солнечных элементов является известным способом расширения спектра поглощения последних в длинноволновую область и, соответственно, повышения их КПД. Для реализации эффективного выноса фотовозбужденных электронов из квантовых ям в [1,2] было предложено использовать эффект резонансного туннелирования, при котором фотоэлектроны последовательно туннелируя из ямы в яму, выходят в область непрерывного спектра и дают вклад в фототок. Для конструирования таких структур необходимо иметь возможность варьировать положение нижних подзон размерного квантования в широких пределах, вплоть до непрерывного спектра, чтобы обеспечить их резонансное согласование в электрическом поле p-i-n перехода. Очевидный метод варьирования ширины квантовых ям, как показано в [2], для этой цели не до конца применим.

В данной работе предложено для управления положением нижней подзоны размерного квантования в квантовой яме вводить в нее серию узких туннельно-прозрачных барьеров. Подбирая количество и расположение барьеров, как показали проведенные нами расчеты энергетического спектра таких структур, можно изменять положение нижней подзоны в широких пределах вплоть до непрерывного спектра. Методом молекулярно-лучевой эпитаксии выращена серия структур из квантовых ям GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As с различными конфигурациями встроенных барьеров и экспериментально (методом низкотемпературной фотolumинесценции) измерены энергии нижних подзон. Эксперимент обнаружил хорошее согласие с расчетными данными, продемонстрировав возможность регулировать положение уровня размерного квантования в требуемых широких пределах.

#### Литература

1. K. W. J. Barnham and G. Duggan, J. Appl. Phys. 67 (1990) 3490.
2. М.П.Теленков, Ю.А.Митягин, КСФ 40(12), 32 (2013) (M.P. Telenkov, Yu.A.Mityagin, Bulletin of the Lebedev Physics Institute, 40(12), 346 (2013))

### МОДЕЛИРОВАНИЕ СТЕКЛОВАНИЯ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА ZR-NB С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Клявинек С.С.

*МФТИ НИУ, Долгопрудный, Россия*

*E-mail: klyavinekss@gmail.com*

Аморфные соединения на сегодняшний день широко распространены в практическом использовании. Они применяются в различных областях промышленности - от оборонной (производстве ограждений), до производства бытовой техники (видеомагнитофоны). В частности, интерес представляет сплав системы Zr-Nb. Он активно используется в реакторостроении и имплантологии из-за подходящих для этого характеристик (модуля Юнга и хороших коррозионных параметров).

В данной работе с использованием метода МД (молекулярной динамики) исследованы аморфные состояния сплава Zr-Nb для различных скоростей охлаждения и концентраций Nb. В расчетах использовался потенциал погруженного атома с угловой зависимостью ADP (angular-dependent potential) [1]. Для устранения поверхностных эффектов применялись периодические граничные условия. Расчеты проведены в условиях постоянного давления для кубической расчетной ячейки. Анализ структуры выполнен с помощью ПКФ (парно-корреляционной функции) и многогранников Вороного [2]. Получена концентрационная зависимость критической скорости охлаждения сплава Zr-Nb. Показано, что для сплава Zr-Nb расщепление второго пика ПКФ Zr-Nb не является критерием стеклования, при этом расщепление второго пика ПКФ Nb-Nb можно служить критерием стеклования. Помимо этого, с помощью многогранников Вороного обнаружено увеличение числа икосаэдрических кластеров при переходе сплава в аморфное состояние. Данный эффект можно рассматривать как критерий стеклования сплава Zr-Nb. Также с использованием различных методов определены температуры стеклования для различного содержания Nb в сплаве и скорости охлаждения. Все расчеты проведены с использованием пакета LAMMPS [3].

#### Литература

1. Smirnova D. E., Starikov S. V. An interatomic potential for simulation of Zr-Nb system //Computational Materials Science. – 2017. – Т. 129. – С. 259-272.
2. A. Stukowski Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010), 015012
3. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics //Journal of computational physics. – 1995. – Т. 117. – №. 1. – С. 1-19.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК УДАРНОГО РАЗРЫВА ПОЛИМЕР-ТКАНЕВЫХ КОМПОЗИТОВ, АРМИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Кобзев В.А., Петров И.С., Панкратов С.А.,  
Михайлов П.О., Лагутин В.Ю.

*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: kobzzzev@mail.ru*

Одной из актуальных задач материаловедения является создание материалов, устойчивых к воздействию скоростных частиц. В настоящее время наиболее перспективными конструкционными материалами являются полимер-тканевые композиты, сочетающие в себе свойства различных компонентов и эффективно противостоящие ударным нагрузкам.

Нанокompозиты – новый тип материалов, отличающийся от обычных композиционных материалов размером упрочняющей фазы. Одними из самых перспективных наполнителей для изготовления нанокompозитов являются углеродные нанотрубки. В работе изучено изменение свойств композитных материалов при введении УНТ в матрицу полимера. Представлены результаты исследования ударной стойкости различных полимер-тканевых нанокompозитов на ударных установках малых и средних скоростей и энергий воздействия.

### Литература

1. Раков Э.Г. Углеродные нанотрубки в новых материалах. Успехи химии, 82 (1) 27-47 (2013).
2. Макунин А.В., Чеченин Н.Г. Полимер-нанокompозиты для космических технологий. «Университетская книга» 2011 г.
3. Раков Э.Г. Материалы из углеродных нанотрубок. «Лес», Russ. Chem. Rev. 82(6), 538-566, (2013).
4. J. Njuguna, K. Pielichowski and J. R. Alcock. Epoxy-Based Fibre Reinforced Nanocomposites: Current Status. Advanced engineering materials, volume 9, issue 10, pages 835-847, October 2007.
5. N.G. Chechenin, P.N. Chernykh, E. A. Vorobyeva, O.S. Timofeev Synthesis and electroconductivity of epoxy/aligned CNTs composites, Appl. Surf. Sci. (2013).

## ЛОКАЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ АТОМОВ ЖЕЛЕЗА В $\text{LiFe}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{PO}_4$ НА РАЗНЫХ СТАДИЯХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ДЕЛИТИРОВАНИЯ

Ковалькова М.В., Востров Н.И., Ярославцев С.А.

*МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: mariefourier27@gmail.com*

Материалы на основе литиевых фосфатов железа являются одними из наиболее перспективных для использования в качестве катодного материала для литий-ионных аккумуляторов и имеют большое преимущество перед другими аналогами из-за химической устойчивости, относительно низкой стоимости и экологичности. Этот материал позволяет также, получить высокую емкость и напряжение аккумулятора, что немаловажно. Настоящая работа посвящена исследованию литиевого фосфата железа, допированного атомами цинка –  $\text{Li}_x\text{Fe}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{PO}_4$ , подвергнутого процессу электрохимической зарядки.

Основная цель работы – изучить влияние допирования атомами цинка на процесс делитирования. Образцы с разной степенью делитирования ( $x \approx 0.8, 0.7, 0.5, 0.4, 0.2$ ) исследовались методами мессбауэровской спектроскопии с привлечением рентгенофа-

зового анализа. Получены мессбауэровские спектры всех исследуемых образцов при температурах выше (295 К) и ниже (5.5 К) температур магнитного упорядочения. Обработка спектров проводилась с использованием программы SpectrRelax [1] методами модельной расшифровки и восстановления распределения сверхтонких параметров спектра.

При электрохимической зарядке происходит изъятие ионов лития из структуры – делитирование. Вследствие этого содержание фазы, соответствующей катионам  $\text{Fe}^{2+}$ , уменьшается, а катионам  $\text{Fe}^{3+}$  возрастает. Эти данные находятся в согласии с результатами, полученными методами мессбауэровской спектроскопии. В результате обработки спектров не обнаружено железосодержащих примесей, что свидетельствует о чистоте исследуемых материалов. Допирование образца атомами цинка приводит к появлению нового локального состояния трехвалентных атомов железа, которого не наблюдается в незамещенных литиевых фосфатах железа. Это связано с появлением в ближайшем катионном окружении катионов  $\text{Fe}^{3+}$  помимо трехвалентных атомов железа атомов цинка, что приводит к изменению сверхтонких параметров мессбауэровского спектра. Кроме того, установлено, что в исследуемой структуре атомы допанта распределены по позициям атомов железа неслучайным образом. Обнаружен также вклад в экспериментальный спектр от двухвалентных атомов железа, находящихся на границе раздела фаз со структурами  $\text{LiFePO}_4$  и  $\text{FePO}_4$ . Помимо этого, при обработке спектров исходного образца обнаружен вклад от парциального спектра релаксационного типа, соответствующего катионам  $\text{Fe}^{3+}$ , что свидетельствует о наличии в образце наноразмерных областей, содержащих преимущественно катионы  $\text{Fe}^{3+}$ . Таким образом, можно сделать вывод, что допирование атомами цинка приводит к значительным изменениям процесса делитирования.

### Литература

1. Matsnev M.E., Rusakov V.S. SpectrRelax: an application for Mössbauer spectra modeling and fitting // AIP Conference Proceedings. – AIP, 2012. Т. 1489. №. 1. С. 178-185.

## РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИФФУЗИОННЫХ ФИЛЬТРОВ-МЕМБРАН

Колесников В.В.

*МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия  
E-mail: kolimir@gmail.com*

В последние годы водород высокой степени чистоты становится всё более и более востребованным. Он находит применение в различных отраслях промышленности, особенно в пищевой и фармацевтической. Основным и самым эффективным способом получения высокочистого водорода является пропускание водородсодержащих газовых смесей сквозь диффузионные фильтр-мембраны, как правило, представляющие из себя фольги из сплавов на основе палладия. Особенности субструктуры, а также внутренние процессы происходящие под воздействием проходящего водорода могут значительным образом влиять на физические характеристики материалов, приводящие к значительным изменениям свойств пропускания материала, или даже к его разрушению. В связи с этим происходит постоянный поиск и исследования новых фольг различного состава, с целью нахождения более дешёвых и более устойчивых альтернатив.

В настоящей работе проведено рентгеноструктурное исследование фольги твёрдого раствора Pd-Pb до после гидрирования. Предположительный состав фольги 8масс.% Pb [1]. Рентгеновский эксперимент выполнен на оборудовании станции «Структурное материаловедение» в Курчатовском научно исследовательском центре [2, 3]. Анализ дифрактограммы показал, что структуре твёрдого раствора в состоянии до и после гидрирования отвечает гранецентрированная кубическая элементарная ячейка ( $Fm\bar{3}m$ ). Дила-



тация решётки составляет 27%, что является причиной сильных микронапряжений. Были рассчитаны параметры решеток, определены эффективные размеры областей когерентного рассеяния, а так же микронапряжения. Был проведён качественный и количественный фазовый анализ и установлен фазовый состав образца. Было обнаружено наличие в образце двух фаз с содержанием свинца 2ат.% и 4ат.%. Также был проведён сравнительный анализ результатов для образца до и после гидрирования, для изучения влияния прошедшего водорода.

### Литература

1. С.В. Горбунов, С.В. Канныкин, Т.Н. Пенкина, Н.Р. Рошан, Е.М. Чистов, Г.С. Бурханов Сплавы палладия со свинцом для очистки и выделения водорода из водородсодержащих газовых смесей // *Металлы*. №1 2017 С. 63—69
2. В.М, Иевлев, Г.С. Бурханов, А.А. Максименко, Е.К. Белоногов, А.И. Донцов, Н.Р. Рошан Структура и свойства конденсированной фольги мембранного сплава Pd-In-Ru // *Конденсированные среды и межфазные границы*, Том 15, № 2, С. 121—127
3. О.В. Акимова, В.В. Колесников Кинетика изменений структурного состояния диффузионных фильтры в процессе длительного отдыха после гидрогенизации // *ЖивКоМ/SSMS-2018, ИМАШ РАН, Москва, Россия, 4—6 декабря 2018 г.*

## ФЕМТОСЕКУНДНАЯ ЛАЗЕРНАЯ МОДИФИКАЦИЯ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ГЕРМАНИЯ И КРЕМНИЯ

Колчин А.В.<sup>1</sup>, Шулейко Д.В.<sup>1</sup>, Кривякин Г.К.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия*

*E-mail: avkolchin@physics.msu.ru*

Сегодня детектирование и преобразование оптического излучения инфракрасного диапазона в электричество в существенной мере связано с применением тонкопленочных структур на основе аморфных германия (a-Ge) и полиморфных структур германий/кремний [1]. Одним из способов модификации их свойств является импульсный лазерный отжиг (ИЛО), в результате которого образуются нанокристаллические области, обуславливающие эффективное поглощение света и транспорт заряда [2]. Применение фемтосекундных импульсов представляется наиболее эффективным по сравнению с наносекундными за счет особенностей диссипации поглощаемой полупроводниками энергии, протекающей после лазерного воздействия [3].

В настоящей работе были исследованы пленки a-Ge толщиной 200 нм и многослойные структуры аморфный германий/аморфный кремний (a-Ge/a-Si) с толщинами слоев 10 и 5 нм, соответственно, сформированные на стеклянных подложках с помощью плазмохимического осаждения. Для ИЛО был использован Cr:Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> лазер (1250 нм, 0.5 мДж, 125 фс, 10 Гц). Структурные и фазовые свойства исходных и облученных образцов были исследованы методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) при длине волны возбуждения 633 нм.

Снимки РЭМ (рис. 1) показали формирование островковых пленок в результате плавления при облучении тонкой пленки a-Ge (рис. 1а). В свою очередь, в случае многослойного образца a-Ge/a-Si наблюдается образование поверхностных структур с периодом 300 нм (рис. 1б), обусловленное возбуждением поверхностных плазмон-поляритонов при интенсивном фотовозбуждении облучаемых слоев [4].

Исследование обоих исходных образцов методом КРС (рис. 2) показало аморфную структуру слоев германия (пик 280 см<sup>-1</sup>). О кристаллизации a-Ge в результате облучения обоих образцов говорит появление линии 300 см<sup>-1</sup>, соответствующей кристаллическому германию (c-Ge). Также для многослойной структуры a-Ge/a-Si наблюдается по-

явление связи Ge-Si (пик  $380\text{ см}^{-1}$ ). Это может быть объяснено отдачей тепла в кремниевый слой при лазерном воздействии.

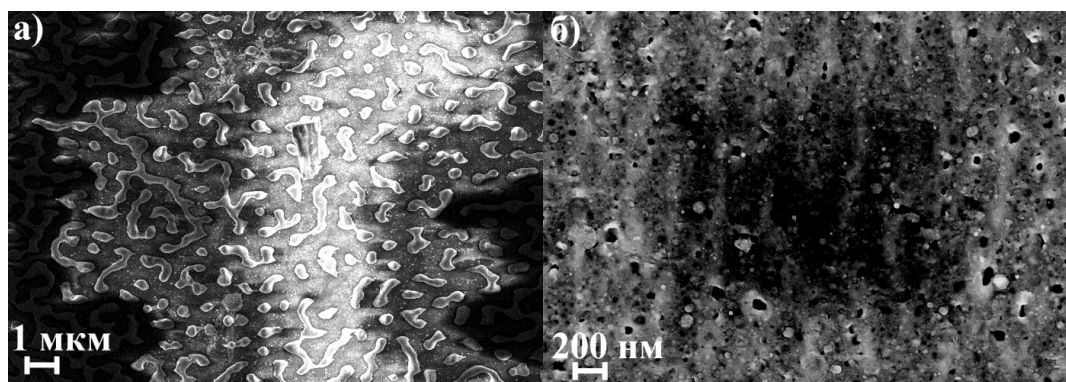


Рис. 1. РЭМ-изображения облученных образцов a-Ge (а) и a-Ge/a-Si (б).

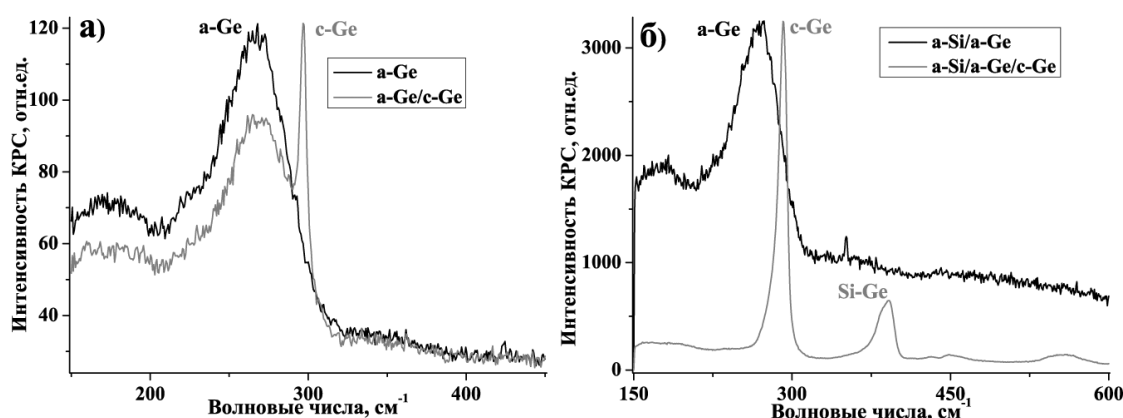


Рис. 2. Спектры КРС исходных и модифицированных образцов a-Ge (а) и a-Ge/a-Si (б).

Таким образом, комбинацией технологий плазмохимического осаждения и фемто-секундного ИЛО можно сформировать структуры на основе a-Ge с включением c-Ge для усовершенствования их применения в оптоэлектронике.

### Литература

1. R. Jimenez, M. Moreno, A. Torres et al. // Phys. Stat. Sol. A 2018 V. 215, № 12, P. 1700736-1 – 1700736-5.
2. O. Salihoglu, U. Kürüm, N. Yaglioglu et al. // J. Appl. Phys. 2011 V. 109, № 12, P. 123108-1 – 123108-9.
3. С.В. Заботнов, Л.А. Головань, И.А. Остапенко и др. // Письма в ЖЭТФ 2006, Т. 83, № 2, С. 76-79.
4. D.V. Shuleiko, F.V. Potemkin, I.A. Romanov et al. // Laser Phys. Lett. 2018 V. 15, P. 056001-1 - 056001-8.

### АНИЗОТРОПИЯ РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА И МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ МЕТАЛЛЕ $\text{Ho}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{V}_{12}$

Красиков К.М.<sup>12</sup>, Краснорусский В.Н.<sup>2</sup>, Хорошилов А.Л.<sup>12</sup>, Случанко Н.Е.<sup>12</sup>

<sup>1</sup>МФТИ НИУ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

Сложность сильно коррелированных электронных систем (СКЭС), обусловленная наличием большого количества конкурирующих взаимодействий, является предметом

для активных обсуждений и исследований. Такие системы обладают очень богатым набором фазовых диаграмм, их анализ оказывается затруднен сложной структурой СКЭС, таких как манганиты с колоссальным магнетосопротивлением, ВТСП купраты и железосодержащие пниктиды. В связи с этим высшие бориды  $RV_{12}$ , обладающие ГЦК структурой, являются модельными объектами для проведения исследований СКЭС со структурной и электронной неустойчивостью. Недавно было показано[1], что присутствие в таких системах динамического кооперативного эффекта Яна-Теллера приводит при низких температурах к образованию динамических зарядовых страйпов вдоль направления  $[110]$ . Присутствие таких полос заряда должно существенным образом модифицировать фазовую диаграмму антиферромагнитных металлов в семействе  $RV_{12}$ , в которых магнитное упорядочение обусловлено непрямым обменным РККИ взаимодействием через электроны проводимости.

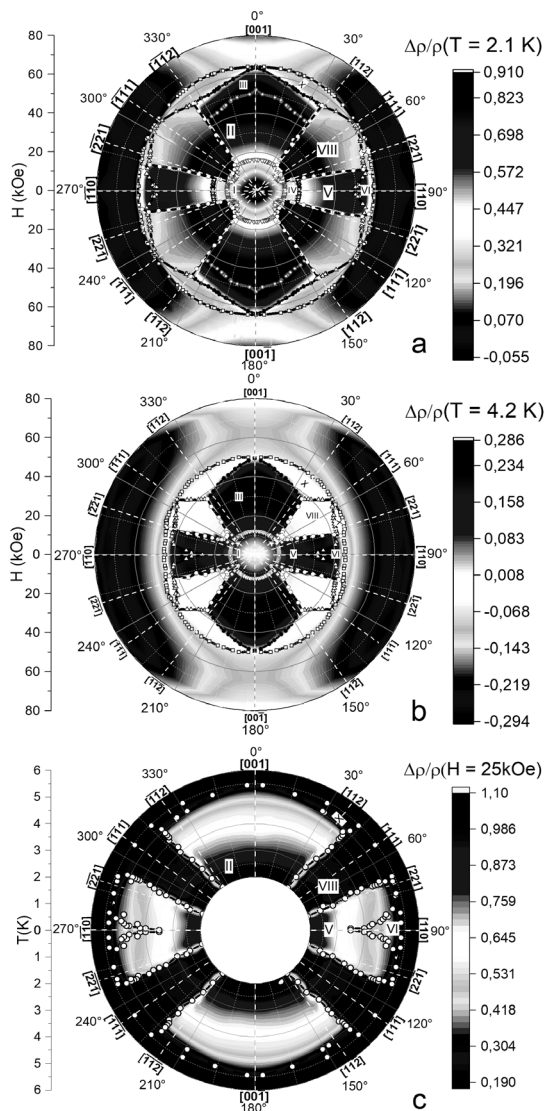


Рис.1 Угловые зависимости магнетосопротивления в полярных координатах для  $T=2.1K$ (a),  $T=4.2K$ (b) и  $H=25kOe$ (c).

С целью выяснения природы магнитных взаимодействий в работе в интервале температур  $T = (2.1-6.5) K$  в широком диапазоне магнитных полей  $H = (0-80) k\text{Э}$  методом вращения образца в магнитном поле были выполнены измерения удельного сопротивления монодоменных монокристаллических образцов антиферромагнетика ( $T_N \approx 5,7K$ )  $Ho_{0.8}Lu_{0.2}V_{12}$  высокого качества.

Полученные результаты представлены на рис.1 в виде зависимостей магнетосопротивления  $\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho(H) - \rho(H=0)}{\rho(H=0)}$  в координатах  $H$ - $\phi$  для температур 2,1K и 4,2K и в координатах  $T$ - $\phi$  для внешнего магнитного поля  $H = 25kOe$ . Видно, что в антиферромагнитном состоянии имеется большое количество фазовых границ, отвечающих переходам между фазами с различной магнитной структурой. Эти фазы сильно различаются по амплитуде магнетосопротивления, достигая максимума ( $\sim 92\%$ ) в поле  $H \approx 50kOe$  вдоль направления  $[001]$  (направление перпендикулярное зарядовым страйпам). Подобное поведение, но с меньшей амплитудой и в меньшем диапазоне углов магнетосопротивление демонстрирует вдоль направления  $[110]$  (направление вдоль зарядовых страйпов). В окрестности направления  $[111]$  (направление магнитной структуры) регистрируются небольшие изменения в амплитуде магнетосопротивления, с максимумом, достигающим 20% при полях  $H \approx 60kOe$ . Вдоль каждого из направлений наблюдается характерный набор особенностей, положение которых меняется с изменением температуры. При увеличении температуры амплитуда пиков магнетосопротивления уменьшается, однако анизотропия присутствует также и в парамагнитной фазе.

При увеличении температуры амплитуда пиков магнетосопротивления уменьшается, однако анизотропия присутствует также и в парамагнитной фазе.

Столь сложная низкосимметричная магнитная фазовая диаграмма необычна и неожиданна для додекаборида с ГЦК кристаллической структурой и, очевидно, является следствием возникновения дополнительного канала рассеяния носителей заряда, которое резко модифицирует магнитное взаимодействие  $4f$ -моментов оболочек ионов Ho через электроны проводимости (РККИ механизм).

Результаты исследований приводят к заключению о том, что вдоль направлений [001] и [110] доминирующим вкладом является линейное по полю положительное магнетосопротивление, которому отвечает рассеяние носителей заряда на волне спиновой плотности. В то же время непосредственно перед AF-P переходом появляется сильное квадратичное по полю отрицательное магнетосопротивление, связанное с рассеянием носителей заряда на локальных магнитных моментах ионов Ho.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФ № 17-12-01426.

### Литература

1. N. Sluchanko, A. Bogach, N. Bolotina, V. Glushkov, S. Demishev, A. Dudka, V. Krasnorussky, O. Khrykina, K. Krasikov, V. Mironov, V. Filipov, and N. Shitsevalova, Phys. Rev. B 97, 035150 (2018).

## КОНТРОЛЬ ГЕРМЕТИЧНОСТИ И НАТЕКАНИЯ ГАЗОВ И АНАЛИЗ ИСПАРЯЕМЫХ ЧАСТИЦ В ДУГОГАСИТЕЛЬНЫХ КАМЕРАХ КВАДРУПОЛЬНЫМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОМ

Кудюкин А.И.

*РГУ имени С.А. Есенина, Рязань, Россия*

*E-mail: a.kudykin@365.rsu.edu.ru*

При наличии дефекта поверхности изделия или паяного шва образуется течь, из-за перепада давлений, гелий из ВДК будет попадать в камеру, к которой подключен масс-спектрометр. По масс-спектру можно понять насколько сильная течь и сравнить с эталонной. ВДК можно считать герметичной если величина течи  $Q_1 < 10^{-6}$  мбар·л/с. При такой течи в систему попадет  $1\text{см}^3$  постороннего газа в течении 12 суток.

Течи возникают в системах благодаря различным дефектам используемых материалов или в соединениях между ними:

- некачественная пайка, сварка или склейка;
- поры и трещины в материале, образовавшиеся благодаря механическому стрессу или в процессе изготовления;
- неплотности в соединениях и фланцах;
- так называемые, "холодные" или "горячие" течи, открывающиеся при экстремальных температурах.

В случае постепенного уменьшения давления в камере масс-спектрометра необходимо проводить подачу сухого азота с применением регулирующих натекателей. Если давление увеличивается, то необходимо частично приоткрыть клапан системы вспомогательной откачки. Проводится выдержка ВДК под давлением. (Рис. 1)

Калибровочная течь представляет собой герметичный металлический баллон, с одной стороны которого находится трубка для подсоединения течи к вакуумной камере. (Рис. 2.) Внутри баллона трубка соединяется с проницаемым элементом, который выглядит как шарообразная колба и кварцевого или молибденового стекла. Стенки баллона, трубки и проницаемого элемента образуют замкнутый объем, заполненный гелием. В процессе эксперимента происходит диффузия гелия через стенки колбы проницаемого элемента. Толщина стенки, площадь поверхности проницаемого элемента и давление гелия в баллоне определяют диапазон потоков, необходимых для калибровки.

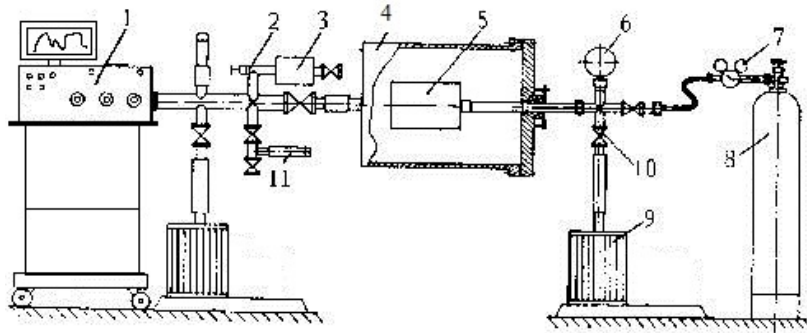


Рис. 1. Схема установки для контроля методом вакуумной камеры. 1 – квадрупольный масс-спектрометр, 2 – натекатель, 3 – баллон с аргоном, 4 – камера, 5 – ВДК, 6 – мановакуметр, 7 – редуктор, 8 – баллон с гелием, 9 – вакуумный насос, 10 – вакуумный клапан, 11 – калибровочная течь.

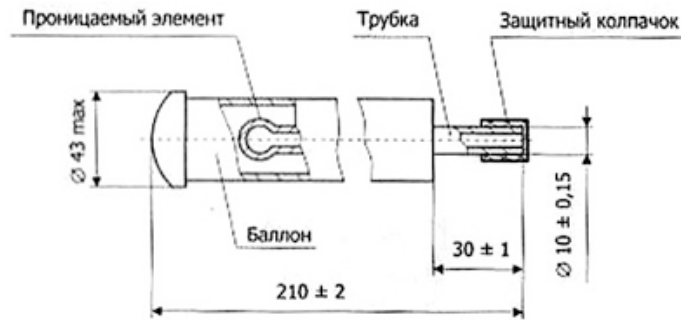


Рис. 2. Схема калибровочной течи.

Калибровочную течь нужно зарегистрировать на масс-спектрометре, чтобы в дальнейшем по масс-спектру эталонной течи следить за другими и сравнивать пики масс-спектрометра. На рисунке 3а видно, что показания гелия минимальны, соответствуют норме вакуумной системы

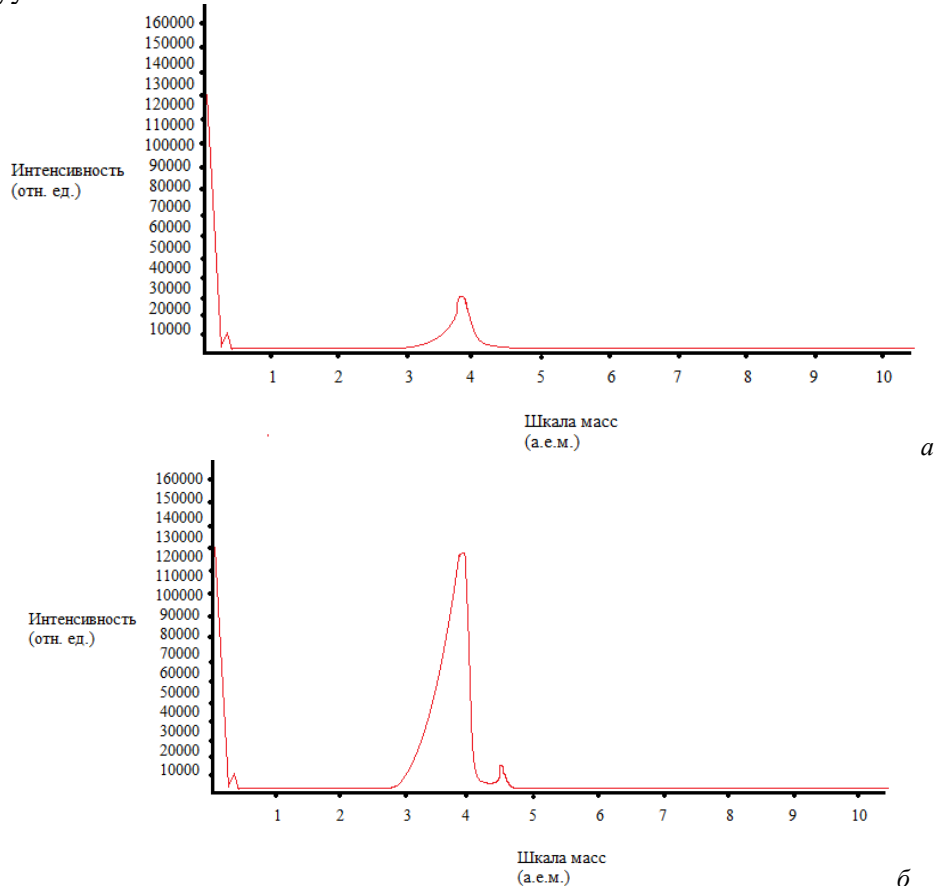


Рис. 3. График формирования пиков масс-спектрометра при калибровочной течи

При дефекте вакуумной дугогасительной камере (некачественная пайка, поры или трещины и т.д.) показания на масс-спектрометре изменятся, интенсивность гелия сильно увеличится, т.к. он начнет проникать через отверстие внутрь вакуумной дугогасительной камеры. (Рис. 3б)

### Литературы

1. Пипко А. И. Конструирование и расчет вакуумных систем [Текст] / А. И. Пипко, В. Я. Плисковский, Е. А. Пенченко — М.: Энергия, 1970. — 504 с.
2. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии [Текст] / А.Т. Лебедев. — М.: Бинум, 2003. — 493 с.
3. Тахистов В.В., Органическая масс-спектрометрия [Текст] / В.В. Тахистов, Д.А. Пономарёв. — СПб.: ВВМ, 2005. — 346 с.
4. Николаев А. Г. Влияние остаточного газа на зарядовое распределение ионов в плазме вакуумного дугового разряда / А. Г. Николаев, Е. М. Окс, Г. Я. Юшков // Журнал технической физики. — 1998. — № 9. — С.24-28.

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА, ПОДВЕРГНУТОГО ФОТОДЕСТРУКЦИИ, МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА: ЭКСПЕРИМЕНТ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ

Кузнецов С.М.<sup>1</sup>, Новиков В.С.<sup>2</sup>

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*

*E-mail: kuznetsov.sm.93@gmail.com*

В структуре поливинилхлорида (ПВХ) под внешним воздействием (температуры, агрессивной среды, ультрафиолетового (УФ) излучения) образуются полиеновые дефекты, которые изменяют механические, оптические и электрические свойства этого полимера. Полиены — это последовательности в органической молекуле, содержащие не менее трёх изолированных или сопряжённых двойных связей С=С. Проблему изменения свойств ПВХ вследствие появления в нём полиенов можно рассмотреть с двух аспектов. Первый — придание материалу новых функциональных свойств, например, улучшение пластичности. Второй — сохранение свойств при эксплуатации и увеличение стойкости ПВХ к деградации. Это обуславливает актуальность определения механизмов образования полиеновых дефектов в ПВХ и важность развития неразрушающих методов контроля этих процессов.

В случае ПВХ спектроскопия резонансного комбинационного рассеяния (КР) света является самым чувствительным методом определения содержания (до 0.0001 %) и распределения по длинам последовательностей полиенов [1, 2]. Однако до настоящего времени спектроскопия КР применялась исключительно для исследования механизма термодеструкции ПВХ.

В нашей работе мы применяем резонансную спектроскопию КР в сочетании с квантово-химическими расчётами для исследования структурных изменений в ПВХ, подвергнутого фотодеструкции.

В работе были зарегистрированы спектры КР ПВХ при длинах волн возбуждающего излучения от 488 до 785 нм.

При возбуждении спектров КР излучением с длиной волны в оптическом диапазоне наблюдалось резонансное усиление интенсивности линий КР полиенов. Длина полиена, выраженная через количество  $n$  сопряжённых двойных связей С=С, связана с частотой  $\nu$  резонансно усиленной линии КР, отвечающей валентным колебаниям этих связей, следующей полуэмпирической зависимостью [1]:

$$\nu = 1461 + 151.2 \cdot \exp[-0.07808 \cdot n] \quad (1)$$

При возбуждении спектров КР излучением с длинами волн 488, 514, 532 и 647 нм в исследованных образцах ПВХ были обнаружены последовательности полиенов соответственно с 12, 14, 15 и 24 сопряжёнными связями. Содержание полиенов определённой длины было оценено по отношению интенсивности резонансно усиленной линии КР, отвечающей колебаниям полиенов, к интенсивности линии КР ПВХ с частотой  $1440\text{ см}^{-1}$ , которая соответствует деформационным колебаниям С—Н связей [1]. Установлено, что при УФ облучении с длиной волны 365 нм и плотностью потока энергии  $30\text{ Вт/м}^2$  в первые 20 часов происходит основное увеличение содержания полиенов (примерно в 20 раз по сравнению с необлучённым образцом), а затем рост их содержания замедляется. При этом наибольшее замедление роста содержания наблюдалось для наиболее длинных последовательностей полиенов (с 24 двойными связями).

С целью проверки зависимости (1) в программе «Природа» [3] методом функционала плотности с применением комбинации функционала плотности OLYP и базиса волновых функций гауссова типа 4z.bas были проведены квантово-химические расчёты спектров КР ряда полиенов (с  $n=3-15, 24$ ), и были проанализированы частоты валентных С=С колебаний.

На рисунке 1 представлены зависимости частоты КР-активного валентного С=С колебания от длины полиена, полученные при помощи формулы (1) и квантово-химических расчётов, а также экспериментальные значения частоты этого колебания в образцах ПВХ, подвергнутых УФ облучению.

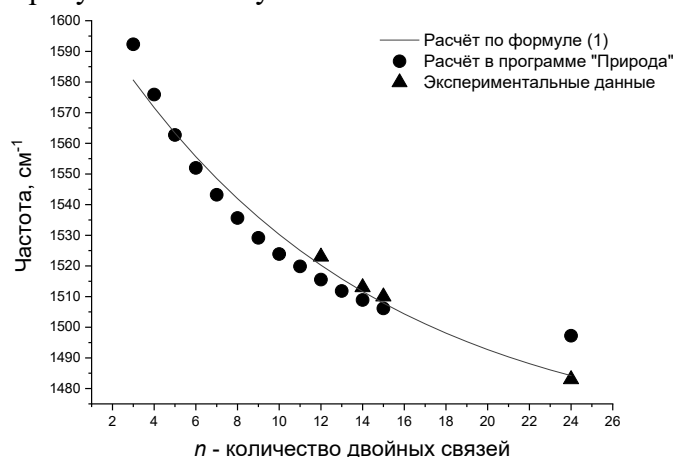


Рис. 1. Зависимости частоты линии КР, отвечающей валентным колебаниям С=С связей, от длины полиена n.

Для экспериментальных данных, приведённых на рисунке 1, длина полиенов, соответствующая резонансным условиям, была рассчитана, исходя из значения длины волны возбуждающего излучения.

Из рисунка 1 видно хорошее согласие экспериментальных данных с данными, полученными при помощи зависимости (1) и квантово-химических расчётов.

Таким образом, в работе было исследовано изменение структуры ПВХ при облучении его УФ излучением. Экспериментально обнаружено увеличение содержания полиенов разной длины. Установлено, что рост содержания полиенов с большей длиной замедляется быстрее, чем полиенов с меньшей длиной. С помощью квантово-химических расчётов спектров КР полиенов была подтверждена зависимость (1), которая позволяет не только определить наличие полиеновых последовательностей в структуре ПВХ, но и рассчитать их длину.

### Литература

1. Hillemans J.P.H.M., Colemonts C.M.C.J., Meier R.J., Kip B.J. An in situ Raman spectroscopic study of the degradation of PVC // Polym. Degrad. Stabil. 1993. V. 42. № 3. P. 323-333.

2. Dong J., Fredericks P.M., George G.A. Studies of the structure and thermal degradation of poly(vinyl chloride)-poly(N-vinyl-2-pyrrolidone) blends by using Raman and FTIR emission spectroscopy // Polym. Degrad. Stabil. 1997. V. 58. № 1-2. P. 159-169.
3. D.N. Laikov, Ustynyuk Yu.A. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing // Russian Chemical Bulletin, International Edition. 2005. Vol. 54. No. 3. P. 820-826.

## ЭПР СПЕКТРОСКОПИЯ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ДИОКСИДА ТИТАНА С ВЫСОКОЙ СТЕПЕНЬЮ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ

Кушников М.П.<sup>1</sup>, Трусов Г.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва Россия

<sup>2</sup>НИТУ «МИСИС», Москва, Россия

E-mail: kushma96@mail.ru, german.v.trusov@gmail.com

Диоксид титана (TiO<sub>2</sub>) является многофункциональным материалом и широко применяется как в химических процессах, так и в электронных устройствах. TiO<sub>2</sub> используется в каталитических и адсорбционных процессах, в газовых сенсорах, в солнечных батареях [1,2]. Оксид титана является наиболее перспективным фотокатализатором очистки воздуха и воды от технологических загрязнений. Однако ввиду большой ширины запрещенной зоны (более 3 эВ) для его фотовозбуждения требуется ультрафиолетовое излучение, что ограничивает сферу применения данного материала. Эффективным способом решения данной проблемы, т.е. смещение поглощения в видимую область, является легирование TiO<sub>2</sub> различными примесями [3,4]. Но часто данная модификация состава TiO<sub>2</sub> приводит к ухудшению его фотокаталитических свойств. Поэтому основной задачей данной работы являлась отработка методов синтеза легированного диоксида титана с целью получения образцов как эффективно поглощающих в видимой области спектра, так и характеризующихся высокой степенью фотокаталитической активности. Поскольку фотокаталитический процесс на поверхности TiO<sub>2</sub> происходит с участием радикалов, то основным методом исследования образцов мы выбрали ЭПР спектроскопию. В качестве легирующих примесей мы выбрали углерод и азот вследствие простоты синтеза и его рентабельности.

Исследование проводилось на ЭПР-спектрометре BRUKER ELEXSYS 500 (рабочая частота 9,5 ГГц - X-диапазон, чувствительность  $5 \times 10^{10}$  спин/Гс) при температуре 300 и 77 К. Для определения окислительной способности образцов была использована реакция фотодеградации красителя Родамина 6Ж. За изменением поверхностной концентрации красителя при облучении следили по величине диффузного отражения ( $R$ ) на длине волны 530 нм (соответствует максимуму поглощения адсорбированного красителя), которая пересчитывалась в величину, пропорциональную поверхностной концентрации ( $\Gamma$ ), по формуле Кубелки-Мунка:  $\Gamma \sim (1-R)^2/2R$ . Освещение образцов осуществляли с помощью ртутной лампы BRUKER ELEXSYS ER 202 UV (интенсивность светового потока составляла 20 мВт/см<sup>2</sup>).

Легированный углеродом образец C-TiO<sub>2</sub> был получен путем гидролиза тетрахлорида титана с гидроксидом тетрабутиламмония с последующим отжигом в течение 1 ч. при 450 °С, 1 ч. при 350 °С и 2 ч. при 200 °С. Площадь удельной поверхности образцов составляла 120 м<sup>2</sup>/г. Легированный азотом диоксид титана был получен путем осаждения гидроксида титана из раствора TiCl<sub>4</sub> (0.25 моль/л) при pH=5 с добавлением аммиака. После выдерживания суспензии в течение суток осадок отфильтровывался и высушивался на воздухе при температуре 350 К. Затем он был измельчен и прокален в муфельной печи при температуре 680 К на протяжении 5 часов. Площадь удельной поверхности образцов составляла 100 м<sup>2</sup>/г.



В ходе исследования было установлено, что полученные образцы отличаются высокой степенью фотокаталитической активности: освещение в течение 30 мин приводило к уменьшению концентрации красителя вследствие его деструкции в 2 раза для  $\text{TiO}_2$ , в 6 раз для углеродных образцов и в 5 раз для азотных.

Были измерены спектры ЭПР всех исследуемых образцов  $\text{TiO}_2$ : исходного и легированного углеродом и азотом. Для определения природы парамагнитных центров и их основных параметров было выполнено компьютерное моделирование экспериментальных спектров ЭПР в программе «SIMFONIA». Для исходных образцов  $\text{TiO}_2$  были получены следующие значения параметров спектра ЭПР:  $g_1 = 2.019$ ,  $g_2 = 2.009$ ,  $g_3 = 2.002$ . Согласно литературным источникам [5] анизотропный сигнал ЭПР с указанными параметрами может быть приписан  $\text{O}_2^-$  радикалам. Углеродные образцы характеризовались  $g = 2.0033$  (оборванные связи углерода);  $g = 2.000$  (электроны, захваченные на кислородные вакансии);  $g = 1.9712$  (объемные  $\text{Ti}^{3+}$  центры) и  $g = 1.948$  (поверхностные  $\text{Ti}^{3+}$  центры) [5]. Азотные образцы характеризовались  $\text{O}_2^-$  радикалами, объемными  $\text{Ti}^{3+}$  центрами и азотными радикалами ( $g_1 = 2.0063$ ,  $g_2 = 2.0052$ ,  $g_3 = 2.0039$  и константы сверхтонкого расщепления  $A_1 = 0.18$  Гс,  $A_2 = 0.38$  Гс,  $A_3 = 3.24$  Гс) [5].

Таким образом, наиболее активными в фотокатализе оказались легированные образцы  $\text{TiO}_2$ . Полученные данные свидетельствует о перспективности полученных структур для применения в области фотокаталитических методов очистки воды и воздуха.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-29-23051 мк).

### Литература

1. Hoffmann, M. R.; Martin, S. T.; Choi, W.; Bahnemann, D. W. Environmental applications of semiconductor photocatalysis. *Chem. Rev.* 1995, 95, 69–96.
2. Chen, X.; Mao, S. S. Titanium Dioxide Nanomaterials: Synthesis, Properties, Modifications, and Applications. *Chem. Rev.* 2007, 107, 2891–2959.
3. Cheng, H.-E.; Lee, W.-J.; Hsu, C.-M.; Hon, M.-H.; Huang, C.-L. Visible light activity of nitrogen-doped  $\text{TiO}_2$  thin films grown by atomic layer deposition. *Electrochem. Solid-State Lett.* 2008, 11 (10), D81–D84.
4. Shah, S. I.; Li, W.; Huang, C. P.; Jung, O.; Ni, C. Study of  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Pd}^{2+}$ ,  $\text{Pt}^{4+}$ , and  $\text{Fe}^{3+}$  dopant effect on photoreactivity of  $\text{TiO}_2$  nanoparticles. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2002, 99, 6482–6486.
5. Kokorin, A. I. In *Chemical physics of nanostructured semiconductors*; Kokorin, A. I., Bahnemann, D.W., Eds.; VSP–Brill Acad. Publ.: Utrecht, Boston, 2003; pp 203–263.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДИПОЛЬНОГО СПИНОВОГО РЕЗОНАНСА ДЛЯ СОСТОЯНИЙ МЕЛКОГО ДОНОРА В НАНОПРОВОЛОКЕ

Лаврухина Е.А

*НГУ имени Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: lavrukhina.phenom3@yandex.ru*

В последнее десятилетие наблюдается стабильный интерес к спиновым явлениям в наноструктурах пониженной размерности, таким как одномерные нанопроволоки [2].

В данной работе представлены краткие результаты теоретического исследования электрического дипольного спинового резонанса (ЭДСР) в твердотельном спиновом кубите на основе мелкого донора [4]. Модель такой структуры представляет собой квантовую точку на базе неглубокого потенциала конфайнмента, которая создается полем затвора в нанопроволоке на основе InSb. Параметры квантовой точки подобраны таким образом, чтобы в ней формировалось одно локализованное состояние с отрица-

тельным значением по энергии. С помощью электродов, ограничивающих нанопроволоку, формируются состояния с положительными энергиями, которые образуют непрерывный спектр. Нанопроволока помещается в магнитное поле с индукцией до 25 мТ, за счет чего происходит двукратное расщепление энергетических уровней по спину. Учет состояний континуума в динамике под влиянием периодического электрического поля является существенным, превращая простую двухуровневую систему в сложную-многоуровневую.

В материале InSb за счет большого электронного g-фактора и постоянной спин-орбитального взаимодействия (СОВ) Рашбы реализуется спиновый резонанс, на основе которого функционирует спиновый кубит [3]

В такой структуре исследуется вероятность перехода электрона из локализованных состояний квантовой точки в состояния континуума в нанопроволоке за счет внешнего переменного электрического поля, амплитуда которого выбрана до 3.00 В/см для обеспечения эффективной работы кубита.

Наличие в модели состояний континуума приводит к сложной нелинейной зависимости временных эволюций среднего значения спина и координаты от амплитуды периодического электрического поля. Расчет динамики в периодическом поле ведется нами с использованием методов теории Флоке [1]. Стробоскопический подход позволяет нам точно изучить эволюцию состояний с помощью N-периодного пропагатора.

Время переворота спина определено из анализа стробоскопической эволюции для среднего значения проекции спина электрона  $\sigma_z(t)$ . Первое значение обращения зависимости  $\sigma_z(t)$  в ноль определяет половину времени переворота спина  $T_{sf}/2$ .

В работе получены зависимости обратного времени переворота спина  $1/T_{sf}$  в единицах обратного периода  $1/T$  электрического поля и среднего значения координаты  $|\langle x_{max} \rangle|$ , как функции амплитуды электрического поля  $F_0$  в диапазоне 0...3 В/см. Эти зависимости построены для двух параметров СОВ Рашбы  $\alpha=6$  мЭВ·нм и  $\alpha=25$  мЭВ·нм и нескольких значений магнитного поля из диапазона 6...25 мТ.

Из полученных результатов мы установили, что, в слабом электрическом поле  $F_0=0.50$  В/см динамика спина и координаты носит регулярный характер, амплитуда координаты имеет порядок размера квантовой точки. В более сильном поле с амплитудой  $F_0=1.50$  В/см, динамика спина и координаты становится сложной, причем амплитуда координаты на порядок превышает размер квантовой точки. Это объясняется значительной ролью состояний континуума во временной динамике, управляемой электрическим полем, тем самым отклоняя изучаемую систему от двухуровневой. Также мы наблюдаем тенденцию насыщения максимально достижимого среднего значения координаты  $|\langle x_{max} \rangle|$  для таких амплитуд переменного электрического поля, которые превышают  $F_0=1.50$  В/см, что указывает на то, что эффективность электрического поля сильно уменьшается при переходе электрона из основного локализованного состояния на большие расстояния по энергии.

Наблюдаемые в расчетах особенности спиновой динамики необходимо учитывать при проектировании различных элементов на базе одномерных наноструктур с квантовыми точками, которые имеют небольшое число локализованных состояний, поскольку важную роль в протекании ЭДСР начинает играть взаимодействие с состояниями континуума.

Работа выполнена при поддержке гранта в рамках проектной части Государственного задания Министерства образования и науки РФ 3.3026.2017/ПЧ, РФФИ 16-57-51045-НИФ\_a и гранта Президента РФ для молодых ученых МК-6679.2018.2

### Литература

1. Штокман Х.-Ю. Квантовый хаос: введение/Под ред. В.Я. Демиховского, Пер. с англ. А.И. Мальшева. М.:ФИЗМАТЛИТ, 2005, 376 с.
2. Jefferson J.H., Ramsak A. and T. Rejec. Entanglement and transport anomalies in nanowires, J.Phys.:Condens.Matter, V.20, p.164206. 2008.

3. Khomitsky D.V., Lavrukhina E.A., Sherman E.Ya. Electric dipole spin resonance at shallow donors in quantum wires. Phys.Rev. B 99, 014308-Published 30 January 2019.
4. Linpeng, X, Karin T., Durnev M.V., Barbour R., Glazov M.M., Sherman E.Ya., Watkins S.P., Seto S., and Kai-Mei C. Fu, Phys. Rev. B 94, 125401. 2016.

### ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ КОБАЛЬТИТА $\text{LaSrCoO}_4$

Лис О.Н.<sup>1,2</sup>, Кичанов С.Е.<sup>2</sup>, Козленко Д.П.<sup>2</sup>, Белушкин А.В.<sup>1,2</sup>, Савенко Б.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> КФУ, Казань, Россия

<sup>2</sup> ОИЯИ, Дубна, Россия

E-mail: lisa\_9477@mail.ru

В последнее время исследования сложных оксидов кобальта привлекают широкий научный интерес, что связано с большим разнообразием физических свойств, обнаруженных в этих материалах. В отличие от манганитов или купратов, кобальтиты обладают уникальной особенностью - возможностью изменения спинового состояния ионов  $\text{Co}^{3+}$  при вариации термодинамических параметров (температуры или давления). Так, в зависимости от баланса сопоставимых по величине внутриатомной обменной энергии  $J_H$  и энергии расщепления кристаллического поля  $\Delta_{CF}$ , в кобальтитах могут быть реализованы немагнитное низко-спиновое LS ( $t_{2g}^6, S = 0$ ) и магнитные промежуточно-спиновое IS ( $t_{2g}^5 e_g^1, S = 1$ ) и высоко-спиновое HS ( $t_{2g}^4 e_g^2, S = 2$ ) состояния. Следует отметить, модельный слоевой кобальтит  $\text{LaSrCoO}_4$ , имеющий только трехвалентные ионы кобальта  $\text{Co}^{3+}$ , привлекает внимание исследователей именно сложной смешанной спиновой конфигурацией: смеси низко-спинового LS и высоко-спинового HS состояний. Такая модель основного спинового состояния ионов кобальта часто дискуSSIONируется в противопоставлении со существованием промежуточно спинового IS состояния в этом кобальтите.

Воздействие высокого давления является прямым методом контролируемого изменения спиновых состояний ионов кобальта за счет вариации межатомных расстояний и соответствующих валентных углов. Проведение исследований при высоких давлениях дают уникальную возможность определения структурных механизмов изменениями спиновых состояний в кобальтитах. Детальные исследования кристаллической структуры  $\text{LaSrCoO}_4$  было проведено методом нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ им. И.М. Франка, ОИЯИ, г. Дубна), с использованием камеры высокого давления с сапфировыми наковальнями, в диапазоне давлений до 5.8 ГПа и температурном диапазоне 7-300 К.

В результате экспериментов были получены барические и температурные зависимости параметров элементарной ячейки, объема и межатомных длин связей соединения  $\text{LaSrCoO}_4$ . Установлено, что апикальные и аксиальные длины связи Co-O сжимаются анизотропно, так что кислородный октаэдр  $\text{CoO}_6$  при приложении высокого давления становится менее симметричным. Такая ситуация создает предпосылки для доминантного заселения  $t_{2g}$  энергетического уровня, что соответствует реализации низкоспинового LS состояния ионов кобальта. Так как, ионный радиус  $\text{Co}_{LS}^{3+}$  больше ионного радиуса  $\text{Co}_{HS}^{3+}$ , то наблюдаются индуцированные высоким давлением изменение таких термодинамических параметров соединения, как коэффициент температурного расширения.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КСЕНОТИМА  $YPO_4$  В РАМКАХ МЕТОДА  
ВСТРОЕННОГО КЛАСТЕРА.

Ломачук Ю.В., Мальцев Д.А., Мосягин Н.С., Зайцевский А.В., Титов А.В.

НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина

Природные ортофосфаты иттрия и редких земель (минералы ксенотим  $YPO_4$  и монацит  $CePO_4$ ) отличаются высокой химической и радиационной стойкостью и рассматриваются в качестве природных аналогов матриц для иммобилизации актинидов.. Упомянутые структуры являются основой широкого класса метамиктных соединений, в состав которых входят в примесных количествах радионуклиды U и Th [1].

Для квантово-механического расчета состояний указанных примесей в кристаллах необходимо построение кластерных моделей.

В настоящей работе на примере кристалла ксенотима  $YPO_4$  показана возможность построения такой модели при помощи разделения кластера на три области:

1. Основной кластер – электроны атомов, входящих в эту область включаются в расчет явным образом, кроме электронов на самых внутренних оболочках тяжелых атомов, которые моделируются введением релятивистских потенциалов остова для соответствующих атомов[2, 3];

2. Слой катионов  $Y^{3+}_{22}$  ближнего окружения – ионы, входящие в эту область, моделируются с использованием 0-электронных релятивистских потенциалов остова и дополнительных электростатических зарядов на ядрах атомов; параметры этих потенциалов вычисляются из результатов расчетов периодической структуры кристалла;

3. Слой анионов  $O^{2-}_{104}$  моделируется электростатическими зарядами на ядрах атомов.

Дополнительные заряды катионов и анионов рассматриваются как параметры потенциала встраивания в кристалл, конкретный вид потенциала определяется из условия минимума средней силы, действующей на атомы основного кластера. Для проверки построенной модели используется сопоставление с результатами расчетов для периодической структуры и экспериментальными данными. Значения средней силы действующей на атомы основного кластера менее чем  $10^{-4}$  ат. ед. при использовании положений ядер атомов, полученных из расчета периодической структуры кристалла, что соответствует смещениям атомов от равновесных положений в кластере порядка 0.001 А.

Для построенной модели вычислены частоты собственных колебаний системы, проведено сопоставление с экспериментальными данными.

С использованием данной модели вычислены свойства ионов U, Th в ксенотиме. Показано, что ионные состояния  $X^{3+}$  энергетически более выгодно, чем  $X^{4+}$  ( $\Delta E \sim 5$  эВ), при этом энергетический выход реакции встраивания показывает, что встраивание  $X^{3+}$  невозможно.

Расчеты проведены с использованием оборудования центра общего доступа ПИК НИЦ КИ ПИЯФ.

**Литература**

1. Nakai I., Akimoto J., Imafuku M. et al. // Phys. and Chem. Of Minerals. 1987. V. 15. N. 2. P. 113–124.
2. Titov A.V., Mosyagin N.S. // Int. J. Quantum Chem. 1999. V. 71. N. 5. P. 359–401.
3. Mosyagin N.S., Zaitsevskii A.V., Skripnikov L.V., Titov A.V. // Int. J. Quantum Chem. 2016. V. 116. N. 4. P. 301-315.

ФОРМИРОВАНИЕ ЦЕНТРОВ ОКРАСКИ ГЕРМАНИЙ-ВАКАНСИЯ (GeV)  
ПРИ СИНТЕЗЕ АЛМАЗА В СВЧ ПЛАЗМЕ

Мартьянов А.К.

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*  
*E-mail: art.martyanov@gmail.com*

В метан-водородной СВЧ плазме (MWCVD) синтезированы поликристаллические алмазные пленки, легированные Ge контролируемым добавлением GeH<sub>4</sub> в качестве источника легирующей примеси. Плёнки демонстрируют интенсивную узкополосную фотолюминесценцию на длине волны 602 нм при комнатной температуре. Найден оптимальный диапазон концентрации GeH<sub>4</sub>.

Центры окраски в алмазе на данный момент являются предметом активных исследований с учетом перспектив их применения в квантовых информационных технологиях [3], оптических биомаркерах и нанометровом магнитном зондировании [4]. Фундаментальные результаты были получены после синтеза алмазов легированных Ge методом высоких давлений и температур [6]. Кристаллы оказались высокого структурного качества с очень узкими и интенсивными линиями фотолюминесценции из GeV-центров. Численные расчеты [7] и сравнительные эксперименты [1] подтвердили, что центры окраски германий-вакансия весьма схожи по структуре и поведению фотолюминесценции с хорошо изученными центрами окраски кремний-вакансия (SiV). Сообщается, что центры GeV перспективны для ряда применений в квантовой оптике, в том числе в качестве однофотонных эмиттеров [5] и температурных датчиков. Однако для практических применений трудно получить (а) образцы большой площади с (b) контролируемым и (c) равномерным распределением примеси Ge с использованием технологии HPHT. Практика работы с центрами SiV показала, что вместо использования объемных HPHT кристаллов алмаза с необходимыми примесями лучше использовать метод CVD для выращивания тонких легированных слоёв алмаза на подложке. Таким образом, разработка метода CVD для контролируемого легирования алмаза в процессе синтеза атомами Ge является важной задачей для практических применений.

Поликристаллические алмазные пленки осаждались на полированные поликристаллические подложки нитрида алюминия AlN размером 10×10×1 мм<sup>3</sup>, засеянные наноалмазными частицами (средний размер 50 нм). Рост алмаза проводился в газовой смеси CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> с содержанием метана в диапазоне 3-10% по отношению к общему входному потоку газов. Общий поток газа 200-750 станд. см<sup>3</sup>/мин, давление в реакторе 50-90 Торр, мощность СВЧ 3.3-5 кВт и температура подложки 750-900 °С. Толщина пленок контролировалась методом лазерной интерферометрии и составляла 2 мкм. Время роста от 40 до 150 минут. Легирование атомами Ge производилось добавлением германа (GeH<sub>4</sub>) с концентрациями 0,2-36% по отношению к содержанию CH<sub>4</sub>. Морфологию поверхности плёнок и размер зёрен исследовали с помощью сканирующего электронного микроскопа Tescan MIRA3. Спектроскопия комбинационного рассеяния и фотолюминесценции проводилась при комнатной температуре с помощью спектрометра LabRam HR840 в конфокальной конфигурации. Спектры предварительно были нормированы на интегральные интенсивности сигнала комбинационного рассеяния света от алмаза (площадь под пиком). Для каждого образца всю площадь алмазной пленки исследовали с помощью 30 измерений с низким разрешением. Отклонение интенсивности пика GeV в спектрах фотолюминесценции после их нормирования составило порядка 20%. Итоговые спектры в высоком разрешении накапливались в 5 различных точках пленки, в среднем по 5 измерений для каждой точки.

На рис. 1 показаны изображения РЭМ поликристаллических алмазных плёнок полученных при различных соотношениях GeH<sub>4</sub>/CH<sub>4</sub>. Хорошо структурированные кристаллиты получены во всех режимах роста, средний размер зерен растёт вместе с кон-

центрацией  $\text{GeH}_4$  от  $\sim 1,2$  мкм для нелегированных плёнок (без добавления  $\text{GeH}_4$ ) до  $\sim 2,6$  мкм при 10%  $\text{Ge}/\text{C}$ .

При достижении концентрации  $\text{Ge}/\text{C} = 0,5\%$ , легированные пленки демонстрируют яркую фотолюминесценцию центров окраски  $\text{GeV}$  с бесфонной линией на длине волны 602,5 нм при комнатной температуре. Интенсивность фотолюминесценции  $\text{GeV}$  немонотонно зависит от концентрации  $\text{GeH}_4$  в подаваемой смеси газов. Найдены оптимальные условия легирования ( $\text{Ge}/\text{C}_{\text{gas}} \approx 10\%$ ), которые максимизируют интенсивность фотолюминесценции  $\text{GeV}$  в диапазоне концентраций германия 0-36%.

Описанные результаты будут использованы для изготовления оптически активных наноалмазов легированных Ge, поли- и монокристаллических плёнок и мембран.

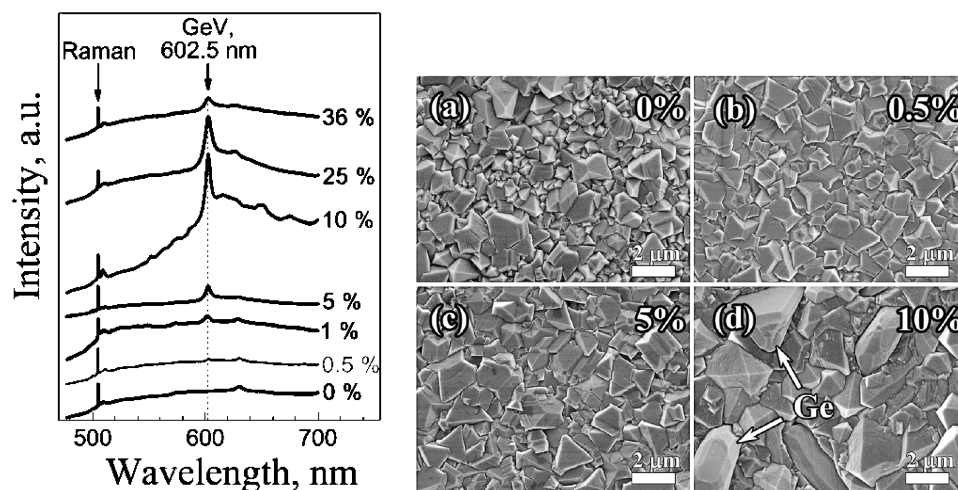


Рис. 1. Слева: спектры фотолюминесценции поликристаллических алмазных плёнок, легированных германием в зависимости от концентрации легирующей примеси в газовой смеси. Справа: изображения РЭМ легированных германием поликристаллических алмазных плёнок, выращенных с различными концентрациями  $\text{Ge}/\text{C}$ : 0% (a), 0,5% (b), 5% (c) и 10% (d). Стрелками обозначены кристаллиты Ge (d).

Особая благодарность выражается соавторам данной работы: Седову В.С., Савину С.С., Большакову А.П., Бушуеву Е.В., Хомичу А.А., Кудрявцеву О.С., Кривобоку В.С., Николаеву С.Н., Ральченко В.Г. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант 14-12-01403-Р.

### Литература

1. Häußler S. et al. Photoluminescence excitation spectroscopy of SiV- and GeV- color center in diamond // *New Journal of Physics*. – 2017. – Т. 19. – №. 6. – С. 063036.
2. Iwasaki T. et al. Germanium-vacancy single color centers in diamond // *Scientific reports*. – 2015. – Т. 5. – С. 12882.
3. Atatüre M. Material platforms for spin-based photonic quantum technologies / M. Atatüre, D. Englund, N. Vamivakas, S.-Y. Lee, J. Wrachtrup // *Nature Reviews Materials* – 2018. – Т. 3 – 38–51с.
4. Atatüre M. et al. Material platforms for spin-based photonic quantum technologies // *Nature Reviews Materials*. – 2018. – Т. 3. – №. 5. – С. 38.
5. Bhaskar M. K. et al. Quantum nonlinear optics with a germanium-vacancy color center in a nanoscale diamond waveguide // *Physical review letters*. – 2017. – Т. 118. – №. 22. – С. 223603.
6. Ekimov E. A. et al. Anharmonicity effects in impurity-vacancy centers in diamond revealed by isotopic shifts and optical measurements // *Physical Review B*. – 2017. – Т. 95. – №. 9. – С. 094113.
7. Komarovskikh A. et al. A DFT calculation of EPR parameters of a germanium-vacancy defect in diamond // *Diamond and Related Materials*. – 2017. – Т. 76. – С. 86-89.

МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ  
В ОКРЕСТНОСТИ НАНОПОР И ОЦЕНКА СКОРОСТИ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ  
ЭЛЕМЕНТОВ ПОВЕРХНОСТИ НАНОПОР В ОЦК И ГЦК МЕТАЛЛАХ

Мельников А.П.

*НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия  
E-mail: melnikovap94@yandex.ru*

Уравнения теории упругости для изотропной среды, по которым во многих работах определяют поля смещений в окрестности дефектов, не учитывают дискретный характер кристаллической структуры материалов [1]. В работе изучалась структура в окрестности нанопор разных размеров в ОЦК и ГЦК металлах с помощью варианта метода Молекулярной Статики [2], использующего итерационную процедуру, в которой атомная структура в окрестности пор и параметр, определяющий смещения атомов, помещенных в упругий континуум, определяются самосогласованным образом. В результате моделирования обнаружено различие смещений атомов, принадлежащих различным кристаллографическим направлениям (причем эти отличия неодинаковы для ОЦК и ГЦК структур), что кардинально отличает результаты моделирования от предсказаний теории упругости для изотропных сред.

Поля смещений в окрестности нанопор приводят к анизотропии составляющих векторов потоков вакансий, нормальных к поверхности поры. В связи с этим, кинетическое уравнение для скоростей перемещения элементов поверхности нанопор зависит от полей деформаций в окрестности дефекта. Полученные кинетические уравнения для различных кристаллографических направлений зависят также от поверхностных энергий кристаллографических плоскостей, которые являются элементами поверхности поры, и соответствуют упомянутым направлениям. На основе этих уравнений проведены расчеты скоростей перемещения элементов поверхности нанопор для различных кристаллографических направлений в широком интервале температур и разных пересыщениях вакансий. Показано, что скорости перемещения по разным кристаллографическим направлениям для ОЦК металлов существенно различаются, причем для направления  $\langle 100 \rangle$  они значительно меньше, чем для других направлений. Этот эффект может приводить к изменению формы первоначально сферических нанопор и обуславливать их превращение в поры кубоидной формы. Проведена также оценка влияния рассчитанных значений поверхностной энергии для различных кристаллографических плоскостей на скорость перемещения элементов поверхности нанопор по соответствующим направлениям.

**Литература**

1. Was G. S. Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys, New York: Springer, 2007
2. Nazarov A.V., Ershova I.V., Volodin Y. S. Simulation of Atomic Structure Near Nanovoids in BCC Iron // 15th International School-Conference "New Materials – Materials of Innovative Energy", 2018, p. 451–457

УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭМИТИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ  
ПРИ ИОННОМ ОБЛУЧЕНИИ

Мерзук Б.<sup>1</sup>, Миннебаев Д.К.<sup>1</sup>, Данилов А.В.<sup>1</sup>, Шемухин А.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*НИИЯФ имени Д.В. Скобельцына, Москва, Россия*

*E-mail: mbarbara1996@mail.ru*

При взаимодействии частиц с твердым телом возникает множество физических процессов, такие как: ионная имплантация, люминесценция, рентгеновское излучение, зарядовые обмены, которые оказывают большое влияние на вещество. Одним из про-

цессов является ионное распыление. Оно было впервые открыто в середине XIX века [1] и применяется в микроэлектронном производстве для напыления тонких пленок, травления рельефа, получение атомарно чистых поверхностей исследовании поверхностей [2] и многом другом. Поэтому понимание процессов, которые происходят при взаимодействии частиц с твердым телом крайне важно. А для этого необходимо знать основные законы угловых распределений частиц.

В данной работе проводится проверка основополагающей теории – теории Зигмунда [3-5], гласящей, что коэффициент распыления зависит от угла распыления следующим образом:

$$\overline{Y} \sim \cos^n \theta.$$

Многочисленные эксперименты показывали, что распыление подчиняется этому закону. Однако, все эти эксперименты были проведены при энергиях до 10 кэВ. Более того, в формуле, хоть и неявно, но очевидно присутствует зависимость от массы, что так или иначе должно влиять на результаты.

Для проведения экспериментов была выбрана хорошо отполированная мишень германия, которая облучалась ионами  $\text{Ar}^+$  при энергиях 80, 200, 250 и 300 кэВ. Анализ распыленных частиц был проведен с помощью коллекторной методики. Количество распыленных атомов германия определяли с помощью резерфодовского обратного рассеяния [6],[7], который был получен и обработан отдельно для каждой точки. После обработки были получены угловые распределения частиц.

После обработки результаты сошлись с теорией Зигмунда, в области низких энергий. Однако при энергиях больше 100 кэВ коэффициент  $n$ , стоящий в степени косинуса вопреки теории начал убывать с ростом энергии [8] хотя и остался в пределах  $1 \leq n \leq 2$ :  $n_{80} = 1,61$ ;  $n_{200} = 1,21$ ;  $n_{250} = 1,23$ ;  $n_{300} = 1,47$

Предположительно, данный эффект мог возникнуть в результате некоторого внутреннего структурного преобразования. При этом, развитие рельефа при ионной бомбардировке не произошло. В работе приведены данные атомно силовой микроскопии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-72-00149)

### Литература

1. W. R. Grove // Trans. Roy. Soc. London. 1852. V. 142. P. 87.
2. Debasree Chowdhury, Debabrata Ghose. Fabrication of nanoscale topographies on Ge(100) surface by low energy  $\text{Ar}^+$  ion sputtering // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Vol. 409, издательство Elsevier BV, Нидерланды, 2017
3. P. Sigmund. Six decades of atomic collisions in solids. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, издательство Elsevier BV, Нидерланды, 2016
4. Sigmund P., Phys. Rev., 184, 383 (1969); 187, 768 (1969).
5. Sigmund P. Mechanisms and theory of physical sputtering by particle impact // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. – 1987. – V. 27. – P. 1-20
6. Распыление твёрдых тел ионной бомбардировкой. Физическое распыление одноэлементных твёрдых тел. / Под ред. Р. Бериша. - Москва: Мир, 1984, 336 с.
7. Распыление твёрдых тел ионной бомбардировкой. Физическое распыление одноэлементных твёрдых тел. Выпуск II/ Под ред. Р. Бериша. - Москва: Мир, 1986, 485 с.
8. T.K. Chini, M. Tanemura, F. Okuyarna. Angular distribution of sputtered Ge atoms by low keV  $\text{Ar}^+$  and  $\text{Ne}^+$  ion bombardment.- Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 119 (I 996).- С.-389



## ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В ГРАФЕНЕ НА МЕДНОЙ ПОДЛОЖКЕ

Миннебаев Д.К.<sup>1</sup>, Евсеев А.П.<sup>1</sup>, Мерзук Б.<sup>1</sup>, Завильгельский А.Д., Шемухин А.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>2</sup>НИИЯФ имени Д.В. Скобельцына, Москва, Россия

E-mail: MinnebaevDK@gmail.com

Идеальный графен представляет собой двумерную аллотропную модификацию углерода, состоящую из ковалентно связанных атомов толщиной в один слой с  $sp^2$  гибридизацией и имеющую гексагональную кристаллическую структуру.

Дефекты в графене влияют на его характеристики - такие как электропроводность и механическая прочность [1]. Необыкновенные свойства графена чрезвычайно чувствительны к дефектам, и некоторые из этих свойств можно наблюдать только при низкой концентрации дефектов [2].

Для изучения дефектов, нами были получены образцы графена выращенные методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) [3] на медной фольге типа «М2» толщиной 50 мкм. Подготовка фольги для CVD роста графена включала следующие этапы: удаление остатков примесей с поверхности, промывание в дистиллированной воде, ультразвуковая очистка сначала в ацетоне, затем в изопропиловом спирте и электрохимическая полировка фольги с последующей очисткой, затем подготовленная подложка была помещена в CVD-реакторе GROW-2S TECH LCC. Внутри реактора располагается кварцевая трубка с внутренним диаметром 4 см и длиной около 100 см, медные фольги были расположены на кварцевом стенде. Сразу после выращивания графена, реактор равномерно охлаждался до 700 °С в течение 30–40 мин.

С помощью сканирующего электронного микроскопа была изучена микроструктура выращенного графена на меди, которая показала, что графен представлен изолированными островками площадью не менее чем  $2 \mu\text{m}^2$ .

Полученные образцы облучались ионами  $\text{Ag}^+$ ,  $\text{He}^+$  с энергией 100 keV. Доза облучения составила  $10^{12}$  и  $10^{13}$  ион/см<sup>2</sup> для  $\text{Ag}^+$  и от  $10^{13}$  до  $10^{16}$  ион/см<sup>2</sup> для  $\text{He}^+$ . Для  $\text{He}^+$  облучение также проводили при непосредственном нагреве образца до 300 °С и 400 °С с дозами облучения  $10^{14}$  и  $10^{15}$  ион/см<sup>2</sup>. Температура контролировалась калиброванной термопарой. Во всех экспериментах угол падения пучка составлял 7°. Плотность тока ионного пучка составляла 100 нА/см<sup>2</sup>. Равномерность пучка в области облучения поддерживалась с помощью высокочастотного ХУ-сканера.

Образцы были исследованы методом спектроскопии комбинационного рассеяния света как наиболее подходящий метод в наших экспериментах [4], по соотношению интенсивностей пиков, полученных с помощью данного метода, были получены данные о дефектообразовании. Все спектры были получены при комнатной температуре с помощью синего лазер 473 нм, мощность лазера была выбрана в соответствии с работой [5], чтобы не вносить изменений в исследуемый образец и не превышала 0,25 мВт.

Проведенные исследования показали, что образование дефектов происходит в три этапа: вначале происходит накопление дефектов в исходном графене, происходит резкое увеличение дефектов, вызванных облучением, вплоть до полного разрушения структуры графена.

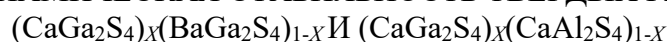
Эксперименты по изучению влияния температуры образца при облучении ионами  $\text{He}^+$  показали, что температурный режим предотвращает разрушение структуры графена.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-72-00149)

## Литература

1. Yilun Liu, Bo Xie, Zhong Zhang, Quanshui Zheng, Xu. Zhiping, Mechanical properties of graphene papers, *J. Mech. Phys. Solids* 60 (14) (2012) 591–605, <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2012.01.002>.
2. Florian Banhart, Jani Kotakoski, Arkady V. Krasheninnikov, Structural defects in graphene, *ACS Nano* 5 (1) (2011) 26–41, <https://doi.org/10.1021/nl102598m>.
3. Xuesong Li, Weiwei Cai, A. Jinho, et al., Large-area synthesis of high-quality and uniform graphene films on copper foils, *Science* 324 (2009), <https://doi.org/10.1126/science.1171245> 593205.
4. E.M. Elsehly, N.G. Chechenin, A.V. Makunin, A.A. Shemukhin, H.A. Motaweh, He ion irradiation effects on multi walled carbon nanotubes structure, *Eur. Phys. J. D* 71 (2017) 79, <https://doi.org/10.1140/epjd/e2017-70658-0>.
5. C.-T. Pan, J.A. Hinks, Q.M. Ramasse, G. Greaves, U. Bangert, S.E. Donnelly, S.J. Haigh, In-situ observation and atomic resolution imaging of the ion irradiation induced amorphisation of grapheme, *Sci. Rep.* 4 (2014) 6334, <https://doi.org/10.1038/srep06334>.

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ



Т.Г. Нагиев, Э.Г. Асадов

*Институт Физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан**E-mail: tural@nagiyev.net*

В работе методом твердофазных реакций синтезированы твердые растворы  $\text{Ca}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Ga}_2\text{S}_4$  и  $\text{Ca}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{S}_4$ . Впервые расчетным путем определены температурно-концентрационные зависимости свободной энергии смешения Гиббса твердых растворов  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{BaGa}_2\text{S}_4)_{1-x}$  и  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{CaAl}_2\text{S}_4)_{1-x}$  из тройных соединений и фазовые диаграммы систем  $\text{CaGa}_2\text{S}_4\text{--BaGa}_2\text{S}_4$  и  $\text{CaGa}_2\text{S}_4\text{--CaAl}_2\text{S}_4$ . Выявлено, что в этих системах образуются непрерывные твердые растворы. При обычных температурах происходит спинодальный распад твердых растворов  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{BaGa}_2\text{S}_4)_{1-x}$  на две фазы.

Соединения  $\text{Ca}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Ga}_2\text{S}_4$  и  $\text{Ca}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{S}_4$  синтезировались методом твердофазных реакций из порошковых компонентов  $\text{CaS}$ ,  $\text{BaS}$  и  $\text{Ga}_2\text{S}_3$ , взятых в стехиометрических соотношениях в графитизированных откачанных кварцевых ампулах.

Для оценки области существования и стабильности полученных твердых растворов вычислили их термодинамические функции смешения, а также кривые ликвидуса и солидуса систем  $\text{CaGa}_2\text{S}_4\text{--BaGa}_2\text{S}_4$  и  $\text{CaGa}_2\text{S}_4\text{--CaAl}_2\text{S}_4$ . На основании теоретических расчетов, можно заключить, что энтальпии смешения твердых растворов, отличающихся по одному химическому элементу, находятся в корреляции с атомным радиусом элемента в виде катиона или аниона. Ионные радиусы для галлия, алюминия, кальция и бария по Гольдшмидту составляют:  $r(\text{Ga}^{+3})=0.62$ ;  $r(\text{Al}^{+3})=0.57$ ;  $r(\text{Ca}^{+2})=1.06$ ;  $r(\text{Ba}^{+2})=1.43$  Å. Для твердых растворов  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{CaAl}_2\text{S}_4)_{1-x}$ , с близкими радиусами катионов, и двумя общими ионами, максимальные значения энтальпии смешения составляют  $\pm 500$  Дж/моль. Исходя из модели регулярных растворов, можем написать:

$$\Delta H_T^0 = 2000x(1-x)$$

Атомные радиусы кальция и бария, близкие по химической природе, существенно отличаются. Поэтому для твердых растворов  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{BaGa}_2\text{S}_4)_{1-x}$  максимальные значения энтальпии смешения могут иметь в пределах 1000-1500 Дж/моль. Учитывая зависимость параметра смешения от состава в модели регулярных растворов, можем написать:

$$\Delta H_T^0 = (6000 + 5000x^2)x(1-x)$$

Мы получили уравнение для расчета свободной энергии смешения твердых растворов  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{CaAl}_2\text{S}_4)_{1-x}$ :

$$\Delta G_T^0 = 2000x(1-x) + 38.3T[x\lg(x) + (1-x)\lg(1-x)]$$

и получили уравнения для расчета свободной энергии смешения твердых растворов  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{BaGa}_2\text{S}_4)_{1-x}$ :

$$\Delta G_T^0 = (6000 + 5000x^2)x(1-x) + 19.15T[x\lg(x) + (1-x)\lg(1-x)].$$

Таким образом, температурно-концентрационные зависимости свободной энергии смешения Гиббса твердых растворов  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{BaGa}_2\text{S}_4)_{1-x}$  и  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{CaAl}_2\text{S}_4)_{1-x}$  из тройных соединений и фазовые диаграммы систем  $\text{CaGa}_2\text{S}_4\text{--BaGa}_2\text{S}_4$  и  $\text{CaGa}_2\text{S}_4\text{--CaAl}_2\text{S}_4$  показывают, что в этих системах образуются непрерывные твердые растворы. При обычных температурах происходит спиноподобный распад твердых растворов  $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{BaGa}_2\text{S}_4)_{1-x}$  на две фазы.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской Республики-Грант № EIF-BGM-3-BRFTF-2+/2017-15/01/1

## ВЛИЯНИЕ ЧУЖЕРОДНЫХ АТОМОВ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ БОР-АЗОТНЫЕ НАНОТРУБКИ

Нематов Д.Д.

*ТТУ имени академика М.С. Осими, Душанбе, Таджикистан*

*E-mail: dilnem@mail.ru*

С использованием метода теории ТФП [1] и многоцелого программного пакета WIEN2k [2] проведено квантово – химическое исследование электронной структуры бор-азотной нанотрубки (БАНТ). В качестве объекта исследования была выбрана нанотрубка BN(3,3). Целью квантово-химических расчетов по методу ТФП было определение таких важных характеристик БАНТ, как ширина запрещенной зоны и плотность состояний до и после легирования. В данной работе приведен результат исследования электронной структуры нитрида бора (BN(3,3)). Далее, с замещением одного атома Ti в кристаллической решётке BN(3,3) исследована зонная структура системы BN+Ti и происходящие в ней изменения.

Атомы бора и азота связаны между собой ионными связями, где длина связи между атомами бора и азота составляет около 1.47 Å. Кристаллические постоянные для нелегированного БАНТ имеют следующие значения:  $a=7.59240\text{Å}$ ,  $b=7.59240\text{Å}$ ,  $c=7.53360\text{Å}$ , с углами  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$  и пространственной группой  $11\_P2/m$ , а для легированного БАНТ  $a=7.59240\text{Å}$ ,  $b=7.59240\text{Å}$ ,  $c=7.66800\text{Å}$ , с углами  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$  и пространственной группой  $6\_Pm$ .

Ниже оптимизации атомной геометрии БАНТ выполнены в k-точке зона Бриллюэна, сгенерированных единообразными параметрами сетки  $1\times 1\times 1$ , а для системы легированного титаном  $1\times 1\times 5$ .

Ширина запрещенной зоны для нанотрубки BN (3,3) в приближении локальной плотности (PBE) [3] методом GGA, равна 4.25 эВ. После легирования титаном ширина запрещенной зоны уменьшается до 0.6 эВ.

Результаты расчетов в рамках PBE по определению ширины запрещенной зоны до и после легирования приведены с помощью рисунка 1 (а, б). Пунктирные линии соответствуют уровням Ферми.

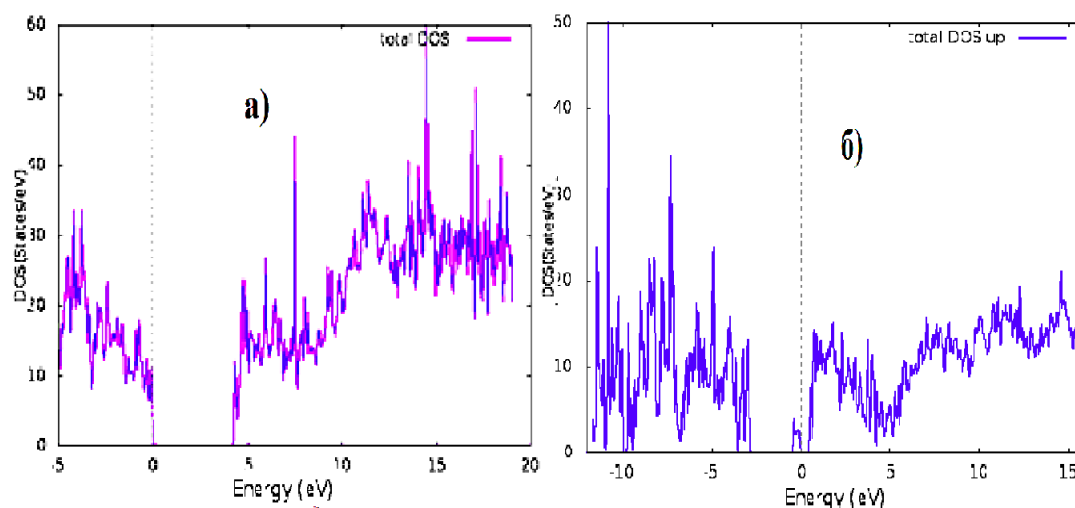


Рис. 1. Общая плотность электронных состояний для: (а) нелегированного BN (б) нанотрубки BN легированной атомом Ti.

Таким образом, сравнительное исследование показывает, что легирование Ti в БАНТ оказывает существенное влияние на модификации их электронных свойств, однако возникает новая щель в области с отрицательными энергетическими значениями вблизи уровня Ферми.

Кванто-химические расчет по методу ТФП дал согласуемый результат, с данными экспериментов. На основе данных электронных свойств БАНТ в дальнейшем представляются возможным изучать многомасштабные динамические и структурные процессы БАНТ и других материалов.

Результаты расчетов с помощью пакета WIEN2k по теории ТФП показывают, что запрещенная зона для легированного БАНТ является слишком малой, что объясняется металлической природу БАНТ.

**Выводы.** В данной работе представлены результаты кванто – механических расчетов с применением ТФП и использованием пакета WIEN2k электронного состояния BN – нанотрубки с целью изучения влияния Ti на электронные свойства БАНТ. Результаты показали, что Ti оказывает сильное влияние на возможность увеличения проводимости БАНТ. Данное исследование послужит основой для дальнейших работ, которые приведут к пониманию роли атомов замещения (подобных титану) на электронные свойства БАНТ, которые используются в современной наномедицине, наноэлектронике, в полевых эмиссионных устройствах и т. д.

Полученные результаты могут быть использованы для верификации теоретических и экспериментальных данных с целью дальнейших разработок БАНТ для таких важных аспектов, как контейнеры доставки биомолекул и лекарств в живых клетках [4].

### Литература

1. Сатанин А.М. Введение в теорию функционала плотности / А. М. Сатанин; НГУ им. Н. И. Лобачевского.-Н. Новгород, 2009.-64с.
2. Schwars K. Solid state calculations using WIEN2k/ K/ Schwars, P. Blaha // Computational Materials Sciens.-2003.-V.28.-P.259-273.
3. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, // Phys. Rev. Lett. 77(18), 3865 (1996).
4. T. A. Hilder and J. M. Hill, Curr. Appl. Phys., 2008, 8, 258–261.

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ БИОКОМПЗИТОВ  
НА ОСНОВЕ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО  
ГИДРОКСИАПАТИТА КАЛЬЦИЯ/L-ЛИЗИНА ГИДРОХЛОРИДА

Никитков К.А.

*ВГУ, физический факультет, Воронеж, Россия*

*E-mail: nikitkov.vsu@gmail.com*

В настоящее время одним из перспективных материалов для создания аналога эмали зуба человека является нанокристаллический карбонат-замещенный гидроксиапатит кальция (КГАП [ $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_{6-x}(\text{CO}_3)_x(\text{OH})_{2-x}$ , где  $0.1 < x < 0.3$ ]) [1]. Включение КГАП в органическую матрицу позволяет воспроизвести структурные особенности нативных тканей зуба. В то же время изучение влияния органического матрикса на организацию нанокристаллов КГАП остается одной из основных проблем при создании биокompозитных материалов. Из литературы известно что, взаимодействие КГАП с аминокислотой (АК) может происходить за счет боковых связей АК посредством образования связи между ортофосфорными тетраэдрами гидроксиапатита ( $\text{PO}_4^{3-,v_4}$  и  $\text{PO}_4^{3-,v_3}$ ) и боковыми группами  $\text{NH}_3^+$  L-лизина гидрохлорида или при наличии дефектов, группы  $\text{COO}^-$  АК могут занимать позиции ОН групп гидроксиапатита [2].

Целью данной работы является изучение взаимодействия карбонат замещенного гидроксиапатита (КГАП) с полярной аминокислотой L-лизином гидрохлоридом, присутствующей в дентине зуба человека. КГАП получали методом химического осаждения с использованием биогенного источника кальция, описанным в работе [3]. Для получения биокompозитов водные растворы синтезированного КГАП и водные растворы L-лизина гидрохлорида в заданной концентрации механически перемешивались до образования однородной массы. Учитывая то, что L-лизин гидрохлорид является полярной аминокислотой, и в зависимости от значения pH среды может находиться в нескольких зарядовых состояниях: анионном, катионном или электронейтральном [4], были синтезированы образцы биокompозитов с различными значениями pH и сопоставлялись с образцами L-лизина различной кислотности.

Влияние зарядового состояния АК на структуру и молекулярный состав КГАП исследовалось методами рентгеновской дифракции (ДРОН-4-07,  $\text{Co } \lambda=1.79\text{\AA}$ ), инфракрасной Фурье спектроскопии (VERTEX V-70, BRUKER) и спектроскопии комбинационного рассеяния (RamMix 532 EnSpectr).

Изучение данных РФА показало, что на дифрактограммах всех образцов биокompозитов не обнаруживаются линии не принадлежащих КГАП или L-лизину гидрохлориду. Анализ дифрактограмм позволил установить, что для L-лизина происходит перераспределение интенсивностей дифракционных максимумов в случае обработки в щелочной среде, что соответствует переходу L-лизина гидрохлорида в биокompозите в анионную форму. Одновременно с этим установлено, что внесение КГАП к образцам L-лизина в кислотной среде дает аналогичное перераспределение дифракционных линий. Такое поведение материалов свидетельствует о поверхностном взаимодействии КГАП и L-лизина гидрохлорида по механизму реакции нейтрализации. Учитывая гетерогенность и неоднородность образцов молекулярный состав композитов, был исследован с использованием методов ИК и КР спектроскопии.

ИК-спектры пропускания синтезированных образцов, полученные методом НПВО в интервале  $1200\text{--}450\text{ см}^{-1}$ , представлены на рисунке 1а. При рассмотрении ИК спектров полученных образцов не обнаружилось мод пропускания не относящихся к КГАП или L-лизины. В образцах КГАП/L-лизин наблюдается перераспределение интенсивностей мод колебаний гидроксиапатита  $\text{PO}_4^{3-,v_4}$  ( $602, 561\text{ см}^{-1}$ ) и  $\text{PO}_4^{3-,v_3}$  ( $1091, 1024\text{ см}^{-1}$ ) и уменьшение интенсивности плеча на  $630\text{ см}^{-1}$ , принадлежащих колебанием ОН групп КГАП (Рис. 1а, кривые 1,2,3) в зависимости от среды и зарядового состояния АК.

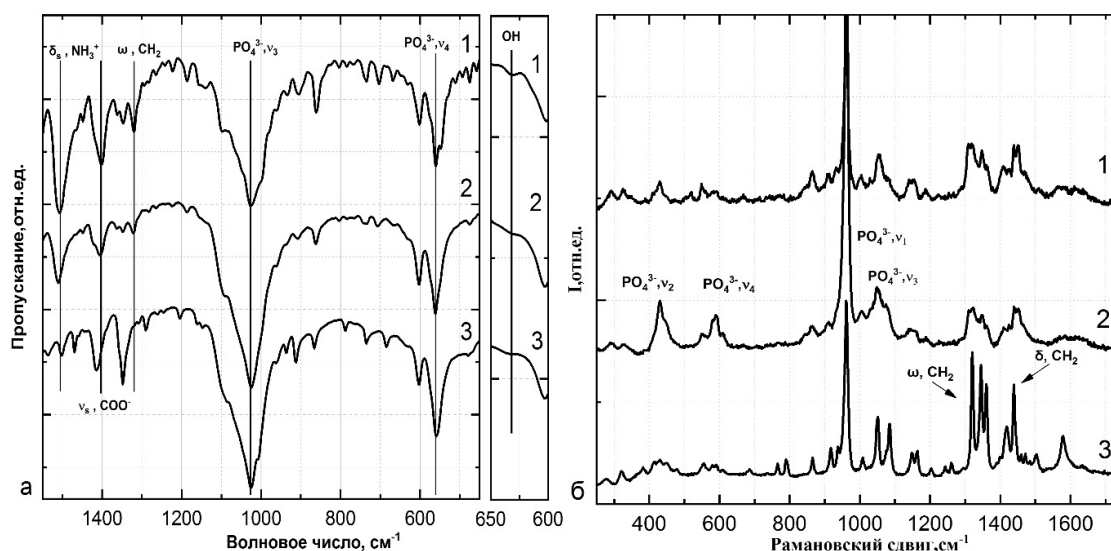


Рис.1.: а) ИК спектры полученных образцов; б) спектры комбинационного рассеяния ( $\lambda=532$  нм) полученных образцов. Образцы: 1 — ГАП/L-лизин (pH=11.2), 2 — ГАП/L-лизин (pH=7.55), 3 — ГАП/L-лизин (pH=5).

Одновременно с изменениями мод КГАП на ИК-спектрах композитов, полученных в кислой среде, происходит перераспределение интенсивностей и сдвиг полос, принадлежащих колебаниям боковых цепей L-лизина  $\text{NH}_3^+$  и  $\text{COO}^-$  в областях  $1500\text{--}1576\text{ см}^{-1}$ ,  $1148\text{--}1161\text{ см}^{-1}$  и  $558\text{--}790\text{ см}^{-1}$  соответственно (Рис.1а, кривая 3)

В то же время спектры комбинационного рассеяния, полученные в области  $250\text{--}4000\text{ см}^{-1}$  (Рис.1б), согласуются с данными РФА о поведении L-лизина в присутствии КГАП в кислой среде (Рис.1б кривая 3). На спектрах комбинационного рассеяния в образцах КГАП/L-лизин наблюдается изменение отношения взаимной интенсивности мод  $\text{PO}_4^{3-}, \nu_1$  ( $960\text{ см}^{-1}$ ) к  $\omega, \text{CH}_2$  ( $1320, 1344, 1358\text{ см}^{-1}$ ),  $\delta, \text{CH}_2$  ( $1420, 1438\text{ см}^{-1}$ ) и  $\text{NH}_3^+$  ( $1578\text{ см}^{-1}$ ), аналогичное изменениям интенсивности полос L-лизина без КГАП при обработке в щелочной среде.

Таким образом, при формировании композита, включающего нанокристаллический КГАП и L-лизин гидрохлорид, происходит химическое взаимодействие между КГАП и L-лизином в случае кислой среды, идущее с образованием анионной формы L-лизина гидрохлорида вследствие основных свойств КГАП. При этом образование связи между группой  $\text{PO}_4^{3-}, \nu_3$  КГАП и  $\text{NH}_3^+$  АК преимущественно осуществляется в кислой среде, а замещение ОН групп гидроксиапатита на карбоксильную группу  $\text{COO}^-$  L-лизина происходит в щелочной среде без изменения фазового состава.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-29-11008 мк.

## Литература

1. Пугляев В.И. Современные биокерамические материалы.
2. Захаров Н.А. et al. Синтетический гидроксиапатит кальция и его природные аналоги // Сорбционные и хроматографические процессы. 2010. Vol. 10, № 6. P. 879–886.
3. Голощапов Д.Л. et al. Получение Нанокристаллического Гидроксиапатита Методом Химического Осаждения С Использованием Биогенного Источника Кальция // Конденсированные Среды И Межфазные Границы. 2011. Vol. 13, № 4. P. 427–441.
4. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия.

## ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ГРАФЕНА В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ЭЛЕКТРОЛИТЕ

Никифоров А.А.<sup>1</sup>, Сюй С.<sup>2</sup>

*МГУ имени М.В.Ломоносова, <sup>1</sup>физический факультет,*

*<sup>2</sup>химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: nikiforov.aa16@physics.msu.ru*

Графен привлекает большой интерес исследователей из-за своих исключительных электрических и механических свойств, которые могут найти широкое применение в электронике и электрохимической энергетике. Для получения графена используют, как правило, химическое окисление неорганическими окислителями [1]. Этот подход требует много ресурсов и времени, он неэкологичен, а продукт нужно очищать от кислоты, что приводит к дополнительным затратам. Электрохимические методы, основанные на интеркаляции ионов в водных [2] и безводных [3] электролитах с последующим расслаиванием графита, более чистые и позволяют сделать синтез быстрее, но также требуют очистки продукта от электролита. Для получения графена без очистки применяют физический способ расщепления графита в сверхкритической среде [4], например, путём повышения и резкого понижения давления, но обычно такой подход характеризуется низким выходом продукта. Таким образом, на данный момент не существует быстрого и эффективного метода синтеза графена, и поиск таких методов является важной задачей. Для её решения мы предлагаем объединить физический и электрохимический подходы и осуществлять синтез графена путем электрохимического окисления в сверхкритическом электролите. Благодаря их синергии, процесс получения графена, как мы ожидаем, станет более эффективным и быстрым.

Чтобы реализовать предложенный подход, мы исследовали процесс электрохимической интеркаляции ионов в графит в сверхкритическом электролите. Для этого в качестве материала мы использовали высокоориентированный пиролитический графит, а в качестве электролита был взят раствор тетрабутиламмония тетрафторбората в смеси ацетонитрил/CO<sub>2</sub>. Интеркаляцию (BF<sub>4</sub>)<sup>-</sup> проводили в потенциостатическом режиме. Степень интеркаляции была исследована методами комбинационного рассеяния света и рентгенофазового анализа. Впервые была показана возможность интеркаляции аниона тетрафторбората из сверхкритического электролита.

### Литература

1. He P. и др. Kinetically Enhanced Bubble-Exfoliation of Graphite toward High-Yield Preparation of High-Quality Graphene // *Chem. Mater.* 2017. Т. 29, № 20. С. 8578–8582.
2. Yu L., Yasuda S., Murakoshi K. Synthesis of Nanometer Size Single Layer Graphene by Moderate Electrochemical Exfoliation. 2012. Т. 212. С. 209–212.
3. Cooper A.J. и др. Single stage electrochemical exfoliation method for the production of few-layer graphene via intercalation of tetraalkylammonium cations // *Carbon* N. Y. Elsevier Ltd, 2013. Т. 66. С. 340–350.
4. Wang W. и др. Highly Efficient Production of Graphene by an Ultrasound Coupled with a Shear Mixer in Supercritical CO<sub>2</sub> // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2018. Т. 57, № 49. С. 16701–16708.

СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЛАНГАСИТАХ  $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$   
И  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ ДО 60 ГПаНикифорова Ю.А.<sup>1,2</sup>, Старчиков С.С.<sup>1,2</sup>, Аксёнов С.Н.<sup>1,2</sup><sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия<sup>2</sup>Институт ядерных исследований РАН, 142190 Москва, Троицк, Россия

E-mail: juliadavudova@gmail.com

Кристаллы семейства лангасита ( $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ ) вызывают большой научный и практический интерес из-за высоких параметров пьезоэлектрических, акустооптических и лазерных свойств [1; 2].

Лангаситы с общей формулой  $\text{A}_3\text{BC}_3\text{D}_2\text{O}_{14}$  [3] относятся к структурному типу  $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$  и имеют слоистую тригональную структуру, пространственная группа  $P321$  ( $Z = 1$ ). В этой нецентросимметричной структуре смешанные слои из тетраэдров С и D - катионов чередуются вдоль оси  $z$  ( $c$ ) со слоями из крупных катионов: А-восьмигранников (томсоновских кубов) и В-октаэдров (Рис. 1).

$\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  и  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  — перспективные кристаллы это семейства, содержащие магнитные катионы. Одновременное наличие электрического и магнитного параметров порядка в этих кристаллах позволяет называть их мультиферроиками.[4] Магнитоэлектрические эффекты в кристаллах  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  наблюдаются только при температурах ниже температуры магнитного упорядочения, которая составляет  $T_N = 27$  К.[5] Поэтому повышение  $T_N$  является одной из задач, важных для практических применений. Одним из способов решения этой задачи является использование методики высоких давлений. Внешнее давление способно существенно изменить кристаллическую структуру, а значит и магнитные и электронные свойства  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ .

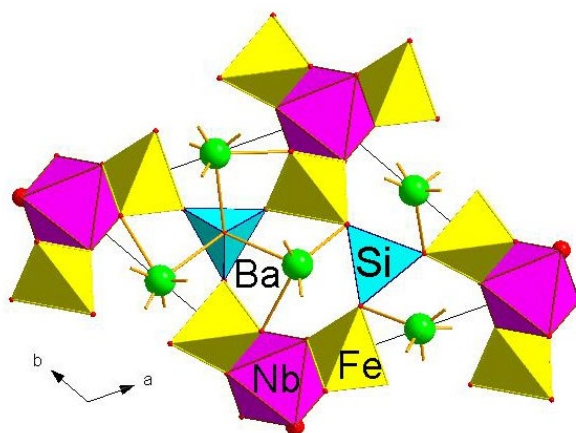


Рис 1. Элементарная ячейка железосодержащего лангасита  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ . Ионы Fe и Si находятся в кислородных тетраэдрах. Ионы Ba расположены в томсоновских кубах, а ионы Nb – внутри октаэдров.

Данная работа посвящена исследованиям порошков кристаллов  $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  и  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  методом синхротронной рентгеновской дифракции при высоких давлениях в камерах с алмазными наковальнями вплоть до 60 ГПа. Обнаружены структурные фазовые переходы в области  $P = 3-5, 15-19$  и 45 ГПа. Наиболее резкие изменения структуры наблюдаются при втором переходе около 17 ГПа, где сильно уменьшается параметр  $c$  элементарной ячейки, и объем ячейки падает скачком на 7 %. Обсуждаются возможные механизмы структурных превращений.

Авторы выражают благодарность проф. д.ф.-м.н. И.С. Любутину, к.ф.-м.н. А.Г. Гаврилюку, к.ф.-м.н. И.А. Трояну, к.х.н. А.Г. Ивановой за руководство и значительную



помощь в проведении работы. Синхротронные исследования были выполнены на станции P02.2 (Extreme Conditions Beamline) DESY, Hamburg, Германия и станции ID18 (Nuclear Resonance Beamline) ESRF, Гренобль, Франция.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (грант # 16-12-10464), РФФИ (грант №17-02-00766).

### Литература

1. B. V. Mill, E. L. Belokoneva, T. Fukuda, New compounds with a  $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_2\text{O}_{14}$  - Type structure:  $\text{A}_3\text{XY}_3\text{Z}_2\text{O}_{14}$ . – 1998. – Т. 43. С. 1168–1175.
2. B.V. Mill, Yu. V. Pisarewky, E.L. Belokoneva, Synthesis, growth and some properties of single crystals with the  $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$  structure. – 2000.
3. E.L. Belokoneva, N.V. Belov, Кристаллическая структура синтетического Ga, Гегеленита  $\text{Ca}_2\text{Ga}_2\text{GeO}_7 = \text{Ca}_2\text{Ga}(\text{GaGe})\text{O}_7$  и сопоставление ее со структурой  $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14} = \text{Ca}_3\text{Ge}[(\text{Ga}_2\text{Ge})\text{Ge}_2\text{O}_{14}]$ . – 1981. – Т. 260. 1363-1366.
4. N. Lee, Y. J. Choi, and S.-W. Cheong, Magnetic control of ferroelectric polarization in a self-formed single magnetoelectric domain of multiferroic  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  Appl. Phys. Lett. 104, 72904 (2014).
5. I. S. Lyubutin, P. G. Naumov, B. V. Mill', K. V. Frolov, E. I. Demikhov, Structural and magnetic properties of the iron-containing langasite family  $\text{A}_3\text{MFe}_3\text{X}_2\text{O}_{14}$  ( $\text{A} = \text{Ba}, \text{Sr}$ ;  $\text{M} = \text{Sb}, \text{Nb}, \text{Ta}$ ;  $\text{X} = \text{Si}, \text{Ge}$ ) observed by Mössbauer spectroscopy // Physical Review B. – 2011. – Т. 84. № 21. С. 1168.

### ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФОРМИРОВАНИЯ СВЕТОИЗЛУЧАЮЩЕЙ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ ФАЗЫ 9R-Si

Никольская А.А., Королев Д.С., Михайлов А.Н., Белов А.И., Конаков А.А., Чигиринский Ю.И., Сушков А.А., Павлов Д.А., Тетельбаум Д.И.

*НГУ имени Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*  
*E-mail: alena.nikolskaya.1994@mail.ru*

Внедрение новых технологий в современную электронику связано с рядом технологических проблем. Так, перспективное решение увеличения скорости обработки и передачи данных с помощью замены электрических межсоединений в интегральных схемах на оптические ограничено тем, что традиционный материал электронной техники – кремний, является непрямозонным полупроводником и, следовательно, его применение в качестве излучателя света затруднено. Поэтому, актуальным считается направление, связанное с поиском светоизлучающих материалов, совместимых с кремниевыми технологиями. Таким материалом могут стать гексагональные модификации кремния, для которых показаны лучшие излучательные свойства по сравнению с алмазоподобным Si [1, 2].

Ранее нами было показано [3, 4], что при ионной имплантации ионов средних энергий в плёнки  $\text{SiO}_2$  на Si с последующим отжигом, происходит формирование гексагонального кремния фазы 9R-Si в слое кремния, прилегающем к плёнке. О том, что сформировалась именно данная фаза, свидетельствовали данные просвечивающей электронной микроскопии и фотолюминесценции. Средние проецированные пробеги ионов во всех случаях были меньше толщины плёнки диоксида кремния. Предполагаемый механизм формирования заключался в том, что релаксация механических напряжений, образованных в плёнке при имплантации, в процессе отжига, приводит к перестройке атомных плоскостей приповерхностного слоя подложки кремния. Для детального изучения механизмов преобразования кубического кремния в гексагональную фазу 9R, в настоящей работе использовались следующие технологические условия и материалы. В качестве исходных служили подложки кремния КЭФ-4.5 (100) с термическим оксидом

толщиной 160 нм. Имплантация ионов  $Kr^+$  проводилась с энергией 80 кэВ и дозой  $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ . Средний проецированный пробег ионов в этом случае составляет 50 нм (согласно расчетам в программе SRIM). Далее производился последовательный отжиг образцов при температурах от 600 до 800 °С. Измерения методом фотolumинесценции (ФЛ) проводились с возбуждением зелёным диодом (530 нм) при температуре жидкого азота.

Спектры ФЛ при последовательном отжиге имплантированных ионами криптона слоев претерпевают трансформацию при увеличении температуры отжига от 600 до 800 °С. Так, при температуре 600 °С в спектре преобладают линии при 1330 и 1400 нм, связанные с дефектами (комплексами междоузельных атомов) в кремнии. Увеличение температуры отжига до 800 °С приводит к снижению интенсивности люминесценции этих линий с одновременным проявлением линии при 1240 нм, которая ранее на основании данных просвечивающей электронной микроскопии и расчетов зонной структуры была отнесена к формирующемуся на границе с плёнкой  $SiO_2$  слою 9R-Si. Появление этого пика с одновременным ослаблением других линий может быть обусловлено перестройкой дефектной системы в упорядоченную структуру гексагонального кремния фазы 9R.

Интересно, что средний проецированный пробег ионов  $Kr^+$  был меньше толщины плёнки, и, следовательно, прямого воздействия на подложку не было. Поэтому, формирование дефектов в Si и дальнейшая трансформация структуры алмазоподобного Si в 9R-Si связывается нами с релаксацией механических напряжений, которые возникли в плёнке при имплантации ионов  $Kr^+$ .

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках проектной части государственного задания (№ 16.2737.2017/4.6), а также РФФИ (18-32-20168). Никольская А.А. признательна за поддержку в рамках программы «УМНИК» (№13192ГУ/2018).

### Литература

1. Rödl C., Sander T., Bechstedt F., Vidal J., Olsson P., Laribi S. and Guillemoles J.F. Wurtzite silicon as a potential absorber in photovoltaics: Tailoring the optical absorption by applying strain // *Phys. Rev. B*. 2015, 92. p. 045207.
2. Fabbri F., Rotunno E., Lazzarini L., Fukata N. and Salviati G. Visible and Infra-red Light Emission in Boron-Doped Wurtzite Silicon Nanowires // *Scientific Reports*. 2014, 4. p. 3603.
3. Korolev D.S., Nikolskaya A.A., Krivulin N.O., Belov A.I., Mikhaylov A.N., Pavlov D.A., Tetelbaum D.I., Sobolev N.A. and Kumar M. Formation of Hexagonal 9R Silicon Polytype by Ion Implantation // *Technical Physics Letters*. 2017, 43. p. 767.
4. Nikolskaya A.A., Korolev D.S., Mikhaylov A.N., Belov A.I., Sushkov A.A., Krivulin N.O., Muhamatchin K.R., Elizarova A.A., Marychev M.O., Konakov A.A., Tetelbaum D.I. and Pavlov D.A. Light-emitting 9R-Si phase formed by  $Kr^+$  ion implantation into  $SiO_2/Si$  substrate // *Appl. Phys. Lett.* 2018, 113. p. 182103.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ НОРМАЛЬНЫХ АЛКАНОВ И КАРОТИНОИДОВ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Новиков В.С., Кузнецов С.М.

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*

*E-mail: vasily1992@gmail.com*

В работе исследованы изомерный состав и спектры комбинационного рассеяния (КР) света двух видов органических молекул - с алифатическими C-C связями (*n*-алканов) и с сопряженными двойными C=C связями (каротиноидов). Эти вещества

имеют важнейшее значение в живой природе и в промышленности и являются идеальными модельными объектами для расшифровки колебательных спектров сложных органических молекул.

*n*-Алканы - простейшая и наиболее доступная гомологическая серия органических молекул, анализ которой позволяет проследить изменения физико-химических свойств с увеличением длины цепи. Методы анализа *n*-алканов (например, определения содержания в смеси) крайне востребованы в нефтехимии и фармацевтике. Для решения этой задачи необходимо учитывать конформационный состав молекул, так как спектр КР *n*-алканов в жидкой фазе является суперпозицией спектров различных конформеров. Результаты исследования колебательных спектров *n*-алканов могут быть использованы при анализе молекул, содержащих полиметиленовые цепи, таких как разветвленные алканы, алкиламмониевые соли, жирные кислоты, олигомеры олефинов и сополимеры этилена.

Каротиноиды выполняют защитные функции антиоксидантов и нейтрализуют свободные радикалы в организме человека [1]. Пониженная концентрация этих веществ в организме может быть следствием несбалансированного питания, повышенного стресса, развития и протекания болезней. В результате ослабление антиоксидантной функции может приводить к преждевременному старению организма. Поскольку исследование кожи человека может проводиться *in vivo* и неинвазивно, то для диагностических целей очень привлекателен анализ содержания и изомерного состава каротиноидов именно в коже. Дополнительным преимуществом такого подхода является резонансное усиление интенсивности линий КР каротиноидов при возбуждении спектров КР излучением видимой области, что позволяет анализировать эти вещества в малых концентрациях [1]. Данные о колебательных спектрах каротиноидов могут быть использованы при анализе других природных и синтетических веществ, содержащих сопряженные двойные связи, например, полиеновых последовательностей в поливинилхлориде, полиацетилене или сополимеров винилена.

Для решения задачи определения изомерного состава и содержания каротиноидов в биотканях были рассчитаны оптимизированные структуры и спектры КР всех каротиноидов, которые содержатся в коже человека — ликопина,  $\beta$ -каротина,  $\alpha$ -каротина,  $\gamma$ -каротина,  $\zeta$ -каротина и лютеина, отличающихся длиной цепи, химическим составом боковых и концевых групп, а также изомеров этих каротиноидов. В чистом виде эти вещества нестабильны, и экспериментальное исследование их спектров КР затруднительно.

Для проведения расчетов использовалась некоммерческая программа Природа 6 [2,3], гибридный функционал OLYP и расширенные базисы (базисные наборы) функций гауссова типа 4z.bas. Теоретические спектры *n*-алканов, полученные с использованием этого приближения, совпали с высокой точностью с экспериментальными. В частности, разница между экспериментальными и рассчитанными частотами линий КР в диапазоне 400 - 1400  $\text{см}^{-1}$  составляла в среднем 5  $\text{см}^{-1}$  без применения процедур масштабирования частот или силовых постоянных. Эта же комбинация функционал/базис использовалась для расчёта спектров КР каротиноидов.

В качестве примера на рисунке 1 показаны спектры КР пентана — экспериментальный и рассчитанный с учётом конформационного состава молекул при оценке содержания конформеров по энергии в соответствии с распределением Больцмана. Для наглядности сравнения данных расчета и эксперимента был смоделирован спектр КР пентана с учетом реальной формы и ширины линий КР, определенных из экспериментальных спектров. Как видно из рисунка 1, наблюдается хорошее согласие между рассчитанными и экспериментальными частотами и интенсивностями линий КР.

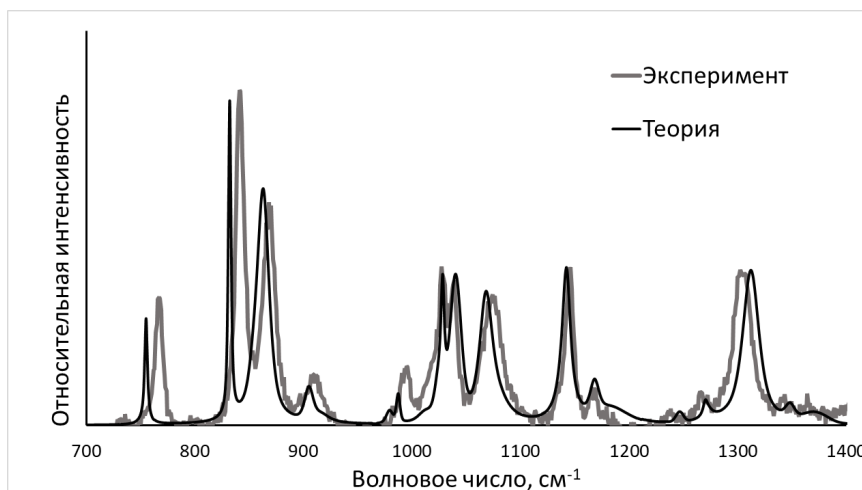


Рис. 1. Сравнение экспериментального и рассчитанного спектров КР пентана.

При исследовании каротиноидов показано, что анализ линий КР, отвечающих валентным колебаниям одинарных и двойных С-С связей, позволяет определять изомерный состав молекул и содержание этих веществ в биотканях. В частности, положение максимума линии, соответствующей валентным колебаниям сопряженных С=С связей, зависит от количества двойных связей в каротиноиде, химического состава концевых групп и типа изомера.

Работа была выполнена при поддержке программы Президиума РАН I.7 "Актуальные проблемы фотоники, зондирование неоднородных сред и материалов".

#### Литература

1. M.E. Darvin, W. Sterry, J. Lademann and T. Vergou. The role of carotenoids in human skin. *Molecules*. Vol.16. Issue 12. P.10491-10506 (2011).
2. D.N. Laikov. Fast evaluation of density functional exchange-correlation terms using the expansion of the electron density in auxiliary basis sets. *Chemical Physics Letters*. Vol.281, Issues 1–3, P.151-156 (1997).
3. D.N. Laikov. A new class of atomic basis functions for accurate electronic structure calculations of molecules. *Chemical Physics Letters*. Vol.416, Issues 1–3, P.116-120 (2005).

## ЭФФЕКТЫ ДИНАМИЧЕСКОГО ОТЖИГА ИОННО-ИНДУЦИРОВАННЫХ РАДИАЦИОННЫХ НАРУШЕНИЙ В АЛМАЗЕ

Овчинников М.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>МАИ (НИУ), Москва, Россия

<sup>2</sup>НИИЯФ имени Д.В. Скобельцына, Москва, Россия

E-mail: ov.mikhail@gmail.com

Алмаз, находящийся в метастабильном состоянии, графитизируется под воздействием ионного облучения практически при любых температурах [1,2]. Радиационные нарушения в алмазе, облученном при комнатной и более низких температурах отжигаются лишь при флуенсах облучения  $\Phi$  не превышающих критическое значение. При флуенсах облучения больших флуенса графитизации  $\sim 10^{16}$  см<sup>-2</sup> отжиг приводит к графитоподобным проводящим структурам ионно-модифицированного слоя. Для алмазов выделяют три температурных режима облучения, связанных разницей в подвижности точечных дефектов, создаваемых в каскаде повреждений при торможении бомбардирующих ионов [1, 2]. Считается, что при температурах выше 500°C как вакансии, так и смещенные междоузельные атомы подвижны. В промежуточной области температур подвижными являются только междоузельные атомы, и, наконец, при температуре ни-

же комнатной и те, и другие дефекты практически не мигрируют в кристалле. Эти режимы отчетливо проявляются на зависимостях электросопротивления облученного алмаза [2, 3]. При облучении алмаза ионами углерода со средними и высокими флуенсами динамический отжиг при температурах выше 500°C приводит к рекристаллизации алмазной фазы [4]. Эффект динамического отжига предсказывали и для других ионов, исходя из описываемых моделей и механизмов, экспериментально наблюдаемых закономерностей ионно-лучевого модифицирования алмаза при низких и промежуточных температурах [1].

С целью исследования возможности динамического отжига алмаза облучением собственными (не углеродными) ионами, в настоящей работе проведены сравнительные исследования структуры и свойств ионно-модифицированных слоев алмазов, облученных ионами инертных газов, азота и углерода с энергией 30 кэВ ( $\Phi \sim 10^{18} \text{ см}^{-2}$ ), с использованием методов дифракции быстрых электронов на отражение (ДОБЭ), спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС).

На рис.1 представлены картины ДОБЭ и спектры КРС (длина волны лазерного излучения 488 нм) после облучения ионами  $\text{C}^+$  и  $\text{Ne}^+$  с энергией 30 кэВ при температуре 650°C. Картина на рис. 1а соответствует дифракции электронов на кристаллической грани (111) кубического кристалла. Динамический отжиг радиационных нарушений в растущем слое при облучении ионами углерода не нарушает исходную кристалличность алмаза. Картина дифракции на поверхности алмаза после облучения ионами неона отличается и представляет собой три размытых кольца характерных для поликристаллического графита (рис. 1б). Размытость колец обычно связывают с недостаточно большими для образования контрастных колец размерами кристаллитов графита. Об этом же, а именно об образовании нанографита, свидетельствуют данные КРС, которые отражают и дополняют описанные ионно-индуцированные структуры. В спектре алмаза, облученного ионами углерода, доминирует пик при смещении  $\Delta k = 1333 \text{ см}^{-1}$  (рис. 1а). О наличии графитоподобного поверхностного слоя после облучения алмаза ионами неона говорят характерные D- и G-полосы в спектре КРС (рис. 1б).

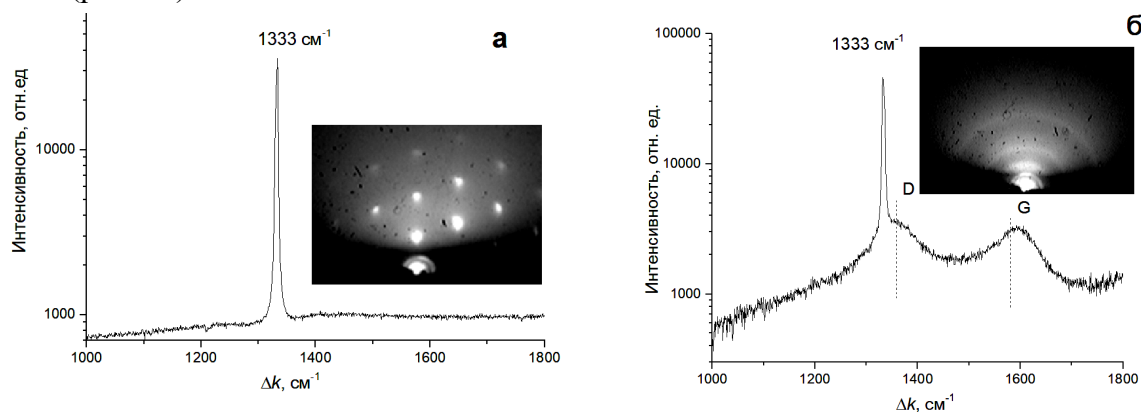


Рис.1 Картины дифракции и спектры КРС после облучения монокристаллического алмаза ионами углерода (а) и неона (б) с энергией 30 кэВ.

Для сравнения структур поверхности проводящего слоя после облучения алмаза ионами углерода и неона использовали метод РФЭС. В методе РФЭС использовали монохроматическое  $\text{AlK}\alpha$ -излучение мощностью 25 Вт. Спектры измеряли при энергии пропускания 69 эВ и шаге сканирования 0.125 эВ. Нормированные по высоте пика спектры фотоэлектронов  $\text{C}1s$  для всех используемых материалов, включая ВОПГ, различаются мало. Однако в области больших значений энергии связи в спектрах облученных алмазов проявляется характерный для графитов плазменный  $\pi$ -пик, отсутствующий в спектре алмаза [5].

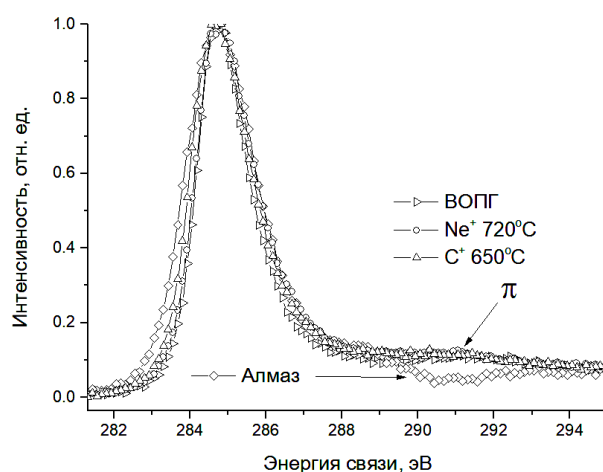


Рис. 2 Спектры C1s поликристаллического алмаза, ВОПГ, облученного ионами C<sup>+</sup> и Ne<sup>+</sup> с энергией 30 кэВ для поликристаллического алмаза.

Полученные данные показывают что динамический отжиг в процессе облучения при температурах выше 500°C приводит к рекристаллизации алмазной фазы только в случае ионов углерода, т.е. при облучении собственными ионами, а облучение примесными ионами приводит к графитизации ионно-модифицированного слоя алмаза.

### Литература

1. Kalish R. // *Semicond. Semimetals*. 2003. V. 76. P. 145.-181
2. Prins J.F. // *Mater. Sci. Rep.* 1992. V. 7. P. 271-364
3. Borisov A.M., Kazakov V.A., Mashkova E.S. et al. // *Vacuum*. 2018. V. 148. P. 195-200
4. Derry T.E., Sellschop J.P.F. // *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*. 1981. V. 191. P. 23-26
5. Speranza G., Laidani N. // *Diam. Relat. Mater.* 2004.V. 13. P. 451-458

### МОРФОЛОГИЯ МАГНИТНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР [(Co<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub>)<sub>34</sub>(SiO<sub>2</sub>)<sub>66</sub>/In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/C]<sub>46</sub> И [(Co<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub>)<sub>34</sub>(SiO<sub>2</sub>)<sub>66</sub>/ZnO/C]<sub>46</sub>

Пешков Я.А., Юраков Ю.А., Ситников А.В.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

*E-mail: yurakov@phys.vsu.ru*

В последние годы возрастает интерес к многослойным наноструктурам (МНС), содержащим ферромагнитные и немагнитные компоненты, которые обладают гигантским магнитосопротивлением и спин-зависимым электронным туннелированием, недостижимыми в объемных материалах, что делает наноразмерные структуры весьма перспективными объектами для применений в спинтронике и СВЧ электронике. Такими материалами являются МНС [(Co<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub>)<sub>34</sub>(SiO<sub>2</sub>)<sub>66</sub>/In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/C]<sub>46</sub> - I и [(Co<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub>)<sub>34</sub>(SiO<sub>2</sub>)<sub>66</sub>/ZnO/C]<sub>46</sub> - II. В качестве магнитной компоненты в них используется ферромагнитный сплав Co<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub>. Многослойные наноструктуры были получены последовательным ионно-лучевым распылением трёх мишеней: пластины сплава Co<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub> с размещенными на её поверхности накладками из SiO<sub>2</sub>, мишени из In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (ZnO) и мишени из графита. В качестве подложек использовали стекло. Толщины металлосодержащих, полупроводниковых и углеродных слоёв в МНС-I составляли 4.7/2.6/0.6 нм, а в МНС-II 4.8/3.6/1 нм, соответственно. Количество трислоёв в МНС обоих типов составляло 46.

В нашей работе представлены данные рентгеновской дифракции (XRD) и рентгеновской рефлектометрии (XRR), полученные на рентгеновском дифрактометре ARL X'TRA, с использованием медного излучения (Cu K<sub>α</sub>).

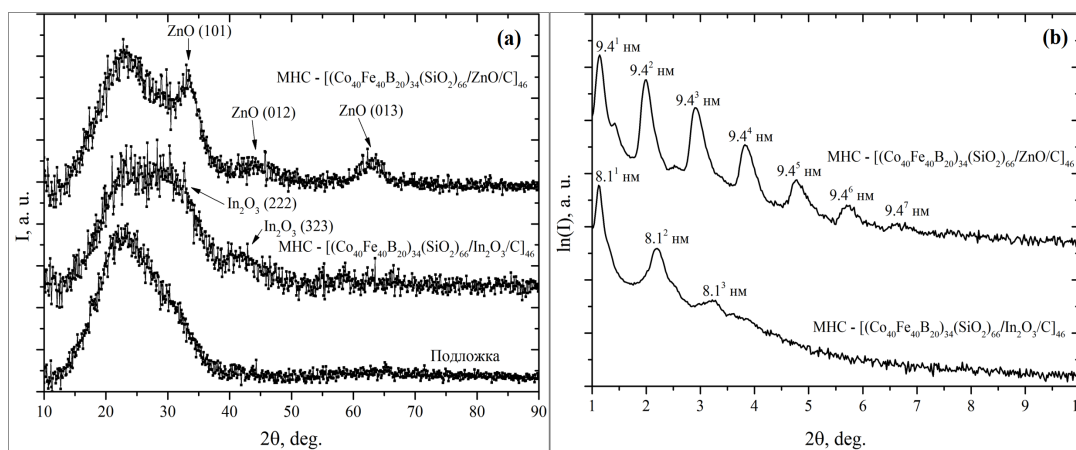


Рис.1. Дифрактограммы (а) и рефлектограммы (b) многослойных наноструктур.

XRD исследования МНС показали, что нанослои  $\text{In}_2\text{O}_3$ ,  $\text{ZnO}$ , полученные ионно-лучевым распылением, имеют признаки кристаллизации (рисунок 1а). В свою очередь, нанослои металлсодержащего композита и углерода рентгеноаморфны (рисунок 1б). Результаты XRR говорят о том, что в МНС-II, содержащей  $\text{ZnO}$ , значения периодов сверхструктуры совпадают с технологически заданными значениями, а в МНС-I, где в качестве полупроводникового слоя использовался  $\text{In}_2\text{O}_3$ , значения периодов немного выше, чем предполагаемые величины. При этом, в МНС-II наблюдается 7 порядков брэгговских отражений, в отличие от МНС-I у которой всего 3 порядка отражений, что говорит о более совершенной сверхструктуре в МНС, содержащей  $\text{ZnO}$ .

## ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ И ОБЪЕМНОЙ ЧАСТИ МАССИВОВ КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ СИНХРОТРОННЫМ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ XANES

Пислярук А.К.<sup>1</sup>, Паринава Е.В.<sup>1</sup>, Коюда Д.А.<sup>1</sup>, Сиваков В.<sup>2</sup>, Турищев С.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Воронежский государственный университет, Воронеж

<sup>2</sup>Лейбниц Институт Фотонных Технологий, Йена, Германия

E-mail: pisliaruk@phys.vsu.ru

Массивы нанонитевидного кремния (НК), сформированные методом металл-ассистированного жидкофазного химического травления (MAWCE), являются перспективным наноструктурированным объектом. Эти объекты обладают такими физико-химическими свойствами, как устойчивая интенсивность фотолюминесценции при комнатной температуре, низкий коэффициент отражения, низкая теплопроводность, и др. Перспективными являются и структуры, в которых массивы НК используются для функционализации их чрезвычайно развитой поверхности, которая достигается путем осаждения или покрытия перспективными материалами матрицы нитевидного кремния.

Актуальными вопросами являются исследования атомного и электронного строения экспериментальными рентгеноспектральными методами, дающими прямую информацию о специфике локального атомного окружения и физико-химическом состоянии. Известно, что метод спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray absorption near edge structure) дает информацию о локальной парциальной плотности свободных электронных состояний вблизи дна зоны проводимости. Использование высокоинтенсивного синхротронного излучения установок класса "мегасайенс" является необходимым условием регистрации спектров высокого разрешения, особенно, когда речь идет о наноматериалах, которые, как правило, характеризуются малыми объемами пробы. Наконец, наиболее разрешенными энерге-

тически являются спектры XANES, полученные при возбуждении неглубоких остовных уровней в ультрамягком рентгеновском диапазоне длин волн. Это приводит к чрезвычайной чувствительности к поверхности рентгеновских спектров, например,  $L_{2,3}$  уровень кремния с диапазоном тонкой структуры вблизи края около 99 - 115 эВ дает информацию о локальном окружении атомов кремния в области, не превышающей 5 нм от поверхности. С другой стороны, исследования наноструктур, таких как НК, требуют понимания специфики атомного и электронного строения в глубине массива нанобъектов, там, где они имеют развитую поверхность, недоступную в целом для диагностических возможностей метода XANES и иных методик, обладающих поверхностной чувствительностью (фото- и Оже- электронная спектроскопия, др.).

В работе нами предложен метод, позволяющий получить информацию о физико-химическом состоянии, атомном и электронном строении глубоких слоев. Морфология образцов НК, сформированных в различных режимах, была изучена методом сканирующей электронной микроскопии. Далее для достижения внутренней ("внутри-объемной") части формируемого массива НК поверхностно-чувствительным методом XANES половина площади поверхности каждого образца механически удалялась путем однократного проведения специально подготовленным лезвием в перчаточном шкафу (glove-box) в инертной атмосфере аргона, препятствующей модифицирующему взаимодействию с атмосферным кислородом. Далее механически модифицированные образцы через шлюзовую камеру устанавливались в объем многокамерной системы спектрометра Российско-германского канала синхротронного накопительного кольца BESSY II (Helmutz-Zentrum-Berlin) без контакта с атмосферой.

Выбранная технология характерна тем, что поверхность образца остается не модифицированной или подверженной химическим или физическим воздействиям. Локальная атомная структура остается неизменной, а согласно последующим исследованиям методом сканирующей электронной микроскопии, большая часть нитей скалывается, и небольшое количество фиксируется на поверхности под углом, вскрывая "боковые" части. Таким образом, предложенная механическая модификация позволяет получить XANES сигнал с объемной части массива НК, включая подложку.

Были получены Si  $L_{2,3}$  и ОК спектры XANES высокого разрешения с нетронутой и механически модифицированной частей подготовленных проб. Полученные рентгено-спектральные данные показали различные характеристики локального окружения атомов кремния и кислорода в поверхностной и "объемной" части массива НК, наблюдаемые в силу различия в режимах и особенностях процессов, протекающих при формировании массивов. Продемонстрирована применимость предлагаемого способа изучения атомного и электронного строения объемной части наноструктур поверхностно-чувствительными методами.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-72-10287).

## TWO-DIMENSIONAL MAGNETOEXCITONS WITH LINEAR DISPERSION LAW

Podlesny I.V.

*Institute of Applied Physics, Chisinau, Republic of Moldova*

*E-mail: podlesniy@rambler.ru*

The electron-hole (e-h) Coulomb exchange interaction in addition to the direct one was taken into account to enlarge the theory of the two-dimensional (2D) magnetoexcitons. The exchange e-h Coulomb scattering takes place with the annihilation and the creation of the e-h pairs with the resultant electronic charges equal to zero. They have dipole-dipole interaction, when the interband dipole moments  $\rho_{c-v}$  are different from zero. It happens when the crystals



have the dipole-active optical quantum transitions. We have considered the semiconductor layers of the type GaAs with *s*-type conduction band and *p*-type valence band with magnetoexcitons formed by electrons with spin projections  $s_z^e = \pm 1/2$  and by heavy holes with full angular momentum projections  $j_z^h = \pm 3/2$ . The Lorentz force in the Landau gauge description determines the positions of the Landau quantization oscillations of the electrons and holes and their distances in the frame of the magnetoexcitons. Their relative and center of mass motions are interconnected. In difference on the direct Coulomb e-h interaction, which gives rise to the quadratic dispersion law  $\hbar^2 k^2 / (2M(B))$  with magnetic mass  $M(B)$  depending on the magnetic field strength  $B$ , the exchange *e-h* Coulomb interaction gives rise to linear dispersion law known as Dirac cone  $\hbar v_g k$  with group velocity  $v_g$  depending on the interband dipole moment in the way:  $v_g \sim |\rho_{c-v} / l_0|^2 \sim B$ , where  $l_0$  is the magnetic length.

The thermodynamic properties of the ideal 2D Bose gas with linear dispersion law were discussed in the Ref. [1]. The critical temperature of the Bose-Einstein condensation (BEC) of the 2D magnetoexcitons is different from zero even at the infinite homogeneous surface area and following [1] is proportional to the group velocity:  $T_c \sim v_g \sim B$ . In the case of the magnetoexcitons it increases with the increasing magnetic field strength  $B$ .

### References

1. Moskaleiko S.A. and Snoke D.W. Bose-Einstein condensation of excitons and biexcitons and coherent nonlinear optics with excitons, Cambridge University Press, 2000.

## РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛАНАРНО-ОСАЖДЕННОГО ГИБРИДНОГО НАНОМАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ БАКТЕРИОФЕРРИТИНА Dps

Праслова Н.В.<sup>1</sup>, Паринаова Е.В.<sup>1</sup>, Чувенкова О.А.<sup>1</sup>, Антипов С.С.<sup>1,2,3</sup>, Коюда Д.А.<sup>1</sup>, Преображенская Е.В.<sup>1</sup>, Беликов Е.А.<sup>1</sup>, Озолинъ О.Н.<sup>2,3</sup>, Домашевская Э.П.<sup>1</sup>, Чумаков Р.Г.<sup>4</sup>, Турищев С.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ВГУ, Воронеж, Россия

<sup>2</sup> Институт биофизики клетки РАН, Пущино, Россия

<sup>3</sup> ПуцГЕНИ, Пущино, Россия

<sup>4</sup> НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия

E-mail: novolokina@phys.vsu.ru

Наноразмерные объекты на основе гибридных биоорганических молекул крайне интересны как с научной, так и с практической точки зрения. С одной стороны, наличие у подобных структур фиксированного внутреннего объема позволяет эффективно контролировать размерный фактор неорганического ядра частицы, с другой стороны, присутствие органической оболочки препятствует двухстороннему обмену кислородом, тем самым позволяя сохранять свойства исходного материала. Знания об атомном и электронном строении, фазовом составе и особенностях взаимодействия гибридных наночастиц с окружающей средой необходимы для понимания механизмов их функционирования как биологических молекул и для их дальнейшего успешного использования в качестве основы для создания наноматериалов. К подобным объектам относятся ферритины, которые могут стать востребованными в различных областях современной науки, техники и технологий, например, наноэлектронике. В последнем случае изучение атомного и электронного строения интересно было бы выполнять при планарном осаждении слоев гибридного материала на полупроводниковую подложку кристаллического кремния.

Белок Dps *Escherichia coli* является представителем особого семейства бактериальных ферритинов. Основными компонентами наноразмерной частицы являются неорганическое ядро диаметром до 5 nm и белковая оболочка размером  $\sim 8-9$  nm. Белковая часть представляет собой 12 одинаковых субъединиц с известной кристаллической

структурой додекамера. Состав и структура ядра исследованы гораздо хуже. Его формирование происходит на основе продуктов окисления ионов железа различного зарядового состояния а возможность минерализации ионов  $Fe^{2+}$  в анаэробных условиях *in vitro* допускает сложный состав ядра у природного Dps.

Большую научную и практическую актуальность при исследовании ферритинов могут представлять исследования XANES (X-ray absorption near edge structure - ближняя тонкая структура края рентгеновского поглощения) в области Fe  $L_{2,3}$  края поглощения - в области мягкого рентгеновского излучения, то есть чувствительные к поверхностному слою  $\sim 10$  нм, что сопоставимо с размерами гибридной наночастицы. Спектры XANES отражают распределение локальной парциальной плотности свободных электронных состояний, анализ которого позволяет определить зарядовое состояние ионов в ядре Dps. Не менее информативен и метод XPS (X-ray photoelectron spectroscopy — рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия), которая позволяет установить зарядовое состояние атомов входящих в состав изучаемого нанослоя поверхности, а в сочетании с ионным фокусированным травлением позволяет проводить профилирование.

На основе предложенного ранее метода подготовки очищенного препарата Dps для сверхвысоковакуумных синхротронных экспериментов XANES в мягкой области рентгеновского спектра проведены эксперименты методами XANES и XPS с планарно осажденным материалов в различных условиях (концентрации, способ и параметры нанесения). Экспериментальные спектры получены на российско-германском канале (RGL) синхротрона BESSY II Гельмгольц-центра Берлин (Берлин, Германия) и канале НАНОФЭС НИЦ "Курчатовский институт" (Москва, Россия). В качестве эталонов для последующего моделирования спектров были использованы Fe  $L_{2,3}$  спектры XANES, полученные от коммерческих образцов оксидов железа. Спектры эталонов регистрировались в тех же условиях, что и образец с нанесенным бактериоферритином Dps.

В ходе проведенных синхротронных экспериментов и математического моделирования XANES и XPS данных было установлено, что состав подготовленного биологического образца имеет композитную природу включающую трехвалентное и двухвалентное железо, причем в различной координации. Присутствие трёхвалентного железа преимущественно. Это подтверждает тот факт, что даже у природного Dps, выделенного из бактерий, выращенных аэробно, возникает композитный ионный состав ядра. Сделан вывод о необходимости изучения дальнейшей термической трансформации гибридных наночастиц.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-72-10287). Авторы выражают благодарность директору и администрации Гельмгольц Центра Берлин, а также координаторам российско-германского канала синхротрона BESSY II Гельмгольц Центра Берлин, источника синхротронного излучения НИЦ "Курчатовский институт".

## О КОРРЕЛЯЦИИ СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ЛЕГИРОВАННЫХ МАНГАНИТОВ ЛАНТАНОВ $La_{1-x}A_xMnO_3$ (A=Ca, Sr)

Пчелина Д.И.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: di.pchelina@physics.msu.ru*

Перовскиты представляют собой особый класс веществ, привлекий в последние годы пристальное внимание широкого круга исследователей. Характерная особенность этих материалов – сильная зависимость свойств от состава, изменение которого приводит к структурным и магнитным преобразованиям. Изменение относительного содержания катиона А и лантана в исследуемых системах  $La_{1-x}A_xMnO_3$  приводит к

изменению соотношения между ионами  $Mn^{3+}$ - $Mn^{4+}$  и влияет на все основные свойства манганитов. Выявление фазового расслоения открывает новые свойства манганитов, и новые возможности их применения.

В работе проведено исследование легированных манганитов лантана  $La_{1-x}A_xMnO_3$  ( $A = Ca, Sr$ ) нестехиометрического и стехиометрического составов с использованием мессбауэровской спектроскопии и магнитных измерений в широком диапазоне температур. Было установлено, что образцы нестехиометрического состава являются однофазными. В образцах стехиометрического состава было выявлено фазовое расслоение, представляющее собой смесь орторомбических фаз  $PnmaI$ ,  $PnmaII$  и  $PnmaII^*$  с различным соотношением их вкладов и отличающихся по своей структуре.

При низких температурах мессбауэровские спектры всех исследуемых образцов демонстрируют релаксационный характер, что может быть связано с наличием малоразмерных магнитных кластеров в структуре. Аналогичные кластеры в системах легированных манганитов лантана были обнаружены в работах [1, 2]. Выявлена зависимость размеров кластеров от легирующего элемента.

Данные, полученные в ходе проведения магнитных исследований, коррелируют с результатами анализа мессбауэровских измерений. В работе проводится сравнение двух исследуемых систем  $La_{1-x}A_xMnO_3$  ( $A=Ca, Sr$ ).

#### Литература

1. В. Hannyer, et al. Colossal magnetoresistance and hyperfine interactions in iron-doped  $La_{0.75}Ca_{0.25}MnO_3$  // Phys. Rev. B. 2000. **61**, p. 9613–9620.
2. J.M. De Teresa, et al. Evidence for magnetic polarons in the magnetoresistive perovskites // Nature. 1997. **386**, p. 256–259.

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ВСТРАИВАНИЯ АЗОТА В УГЛЕРОДНЫЕ СТРУКТУРЫ

Рогатнев С.С., Евлашин С.А.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия  
Сколковский институт науки и технологий, Москва, Сколково, Россия  
E-mail: steperrr@rambler.ru*

Потребность в стабильных и дешевых накопителях энергии, используемых для портативной электроники, электротранспорта, возобновляемых источников энергии увеличивается с каждым годом. К электрохимическим источникам энергии предъявляется существенный ряд требований, среди которых стабильность, высокое значение удельной энергии, способность работать в широких диапазонах температур и многое другое. Среди электрохимических источников энергии можно выделить несколько наиболее перспективных классов: суперконденсаторы, псевдосуперконденсаторы, ионные батареи. В разработке суперконденсаторов достигнут значительный прогресс благодаря использованию материалов с большой удельной площадью поверхности, но значение удельной емкости оказывается небольшим. Псевдосуперконденсаторы представляют собой источники энергии, которые объединяют в себе двойнослойную ёмкость суперконденсаторов и окислительно-восстановительные реакции, которые в свою очередь позволяют существенно увеличить значение удельной емкости электрохимических источников.

Удельная теоретическая емкость псевдосуперконденсаторов достигает 2000 Ф/г. [1,2] Такие большие удельные емкости получают за счет окислительно-восстановительных реакций наночастиц оксидов металлов, входящих в состав электродов. Наиболее перспективной альтернативой применению наночастиц является создание дефектов и внедрение различных легирующих примесей непосредственно в решетку углеродных материалов, например C-N, C-B. Внедрение нескольких процентов азота

в углеродную решетку позволяет увеличить электрохимическую емкость в несколько раз [1].

Углеродные наностенки представляют из себя графеноподобный материал, который ориентирован практически перпендикулярно подложке, что является источником большой удельной площади поверхности  $2630 \text{ м}^2/\text{г}$ . [3] Такие структуры выглядят перспективным материалом для создания электродов электрохимических источников тока и их удельная емкость достигает  $120 \text{ Ф/г}$  [4].

В данной работе для увеличения емкости углеродных наностенок использовалась обработка в плазме постоянного тока, которая приводит к встраиванию 3% ат. азота. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния использовалась для анализа полученных результатов. Значение удельной емкости углеродных наностенок было увеличено со 120 до  $700 \text{ Ф/г}$ . В результате работы было проведено молекулярно-динамическое моделирование, объяснившее механизмы встраивания азота в углеродную решетку.

### Литература

1. Wang H., Maiyalagan T., Wang X. Review on recent progress in nitrogen-doped graphene: synthesis, characterization, and its potential applications // *ACS catalysis*. – 2012. – Т. 2. – №. 5. – С. 781-794.
2. Lin T. et al. Nitrogen-doped mesoporous carbon of extraordinary capacitance for electrochemical energy storage // *Science*. – 2015. – Т. 350. – №. 6267. – С. 1508-1513.
3. Hiramatsu M., Hori M. Carbon nanowalls: synthesis and emerging applications. – Springer Science & Business Media, 2010.
4. Krivchenko, V. A., Maksimov, Y. M., Podlovchenko, B. I., Rakhimov, A. T., Suetin, N. V., & Timofeev, M. A. (2011). Electrochemical activation of carbon nanowalls. *Mendeleev Communications*, 21(5), 264-265.

## ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И ТРИБОЛОГИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ХРОМ-НАНОАЛМАЗНЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Рэйлян М.Д.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: md.reilyanu@physics.msu.ru*

Проведено комплексное исследование (рентгеновская дифракция, химический анализ, спектроскопия комбинационного рассеяния, определение коэффициента трения и работоспособности покрытий) структурно-фазового состояния, тонкой атомной структуры, механических и трибологических характеристик вакуумных ионно-плазменных хром-наноалмазных покрытий. Образцы были получены с помощью мишеней двух типов: массивных хромовых мишеней с отверстиями, в который помещался наноалмазный порошок (составная мишень) и мишеней, изготовленных спеканием смеси хромового порошка и наноалмазов детонационного синтеза (спеченная мишень).

Наноалмазы (НА) детонационного синтеза (НАДС) являются перспективным новым типом нано-структурированных углеродных материалов. В настоящее время НА используются в качестве добавок, повышающих эксплуатационные свойства самых различных материалов. Ожидается, что рост содержания НА в покрытиях приведет к возрастанию их износостойкости (срок службы изделий увеличится от 2-х до 10-ти раз).

В таблице приведены данные о химическом и фазовом составе покрытий, изученных в данной работе, а на рис. 1 представлены данные по нанотвердости и результатам трибологических испытаний образцов исследованных покрытий.

№ п.п.	Тип мишени	Условия напыления	Химический состав ат. % ( $\pm 0,1$ ат.%)			Фазовый состав, $\pm 6$ об. %
			Cr	C	N	
1	Cr	Ar	90,7	9,3	–	Cr
2	Cr+ND (составная)	Ar	91,3	8,7	–	Cr
3	Cr	Ar + N <sub>2</sub> (5:1)	78,2	7,5	12,2	Cr + Cr <sub>2</sub> N (64%, 36%)
4	Cr+ND (составная)	Ar + N <sub>2</sub> (5:1)	75,9	7,6	14,3	Cr + Cr <sub>2</sub> N (37%, 63%)
5	Cr+ND (составная)	Ar + N <sub>2</sub> (7:1)	72,5	16,4	8,1	Cr + Cr <sub>2</sub> N <sub>0,4</sub> C <sub>0,6</sub> (46%, 54%)
6	Cr+ND (составная)	Ar + N <sub>2</sub> (7:1) U <sub>см</sub> = – 60 В	78,6	8	11,6	Cr + Cr <sub>2</sub> N (75%, 25%)
7	Cr+ND (спекенная)	Ar	58,5	40,6	–	Cr + Cr <sub>7</sub> C <sub>3</sub> (60%, 40%)

Из рис. 1 видно, что самую высокую работоспособность в ходе трибологических испытаний имело покрытие системы Cr–НА (7 образец) с высокой (~30 ГПа) нанотвердостью, полученное с помощью спекаемой мишени. Также можно отметить, что коэффициент трения ( $f \sim 0.3$ ) в покрытиях Cr–НА практически не зависит от состава, твердости и модуля упругости в отличие от *a*-C:H:Cr покрытий [1].

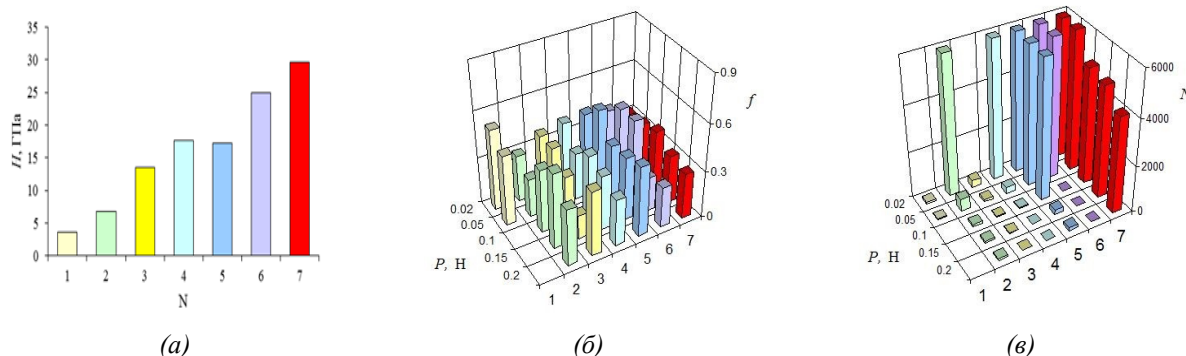


Рис.1. Твердость покрытий (а) и зависимость трибологических свойств от нагрузки  $P$ ; (б) – коэффициент трения  $f$ ; (в) – число циклов до разрушения покрытий  $N$ .

Приближенная оценка, основанная на знании химического состава и результатах количественного рентгенофазового анализа хромуглеродных покрытий, полученных с использованием НА, показала, что в них порядка 10–15 ат. % углерода должно находиться в несвязанном состоянии. Поскольку природа этого свободного углерода представляет значительный интерес, было проведено исследование спектров комбинационного рассеяния Cr–НА-покрытий, которое показало, что характер распределения в них углерода существенно отличается от наблюдаемого в АПП покрытиях, легированных хромом, где аморфный углерод выступал в роли матрицы, в которой распределены «армирующие» ее наноразмерные включения хрома и его фаз [1].

Полученные результаты позволяют предположить, что матрица хромуглеродного композита, получаемого распылением хром-наноалмазных мишеней, представляет структуру, в которой отдельные зерна имеют многослойную структуру, состоящую из чередующихся наноразмерных слоев хрома и его карбида. В отличие от хрома и его фаз нанометровых размеров, твердый углерод в Cr–НА покрытиях, согласно данным спектроскопии КР, имеет вид достаточно больших частиц размером 2–10 мкм с разным типом графито- и алмазоподобной структуры, в которых отношение  $sp^3/sp^2$ , определяемое соотношением интенсивностей спектральных линий  $D$  и  $G$  рамановского спектра, может меняться в очень широких пределах (рис.2).

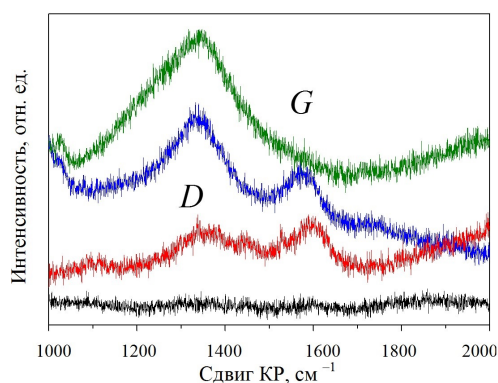


Рис. 2. Спектры КР, полученные от разных агломератов одного покрытия.

Можно предположить, что микронного размера частицы углерода с меняющейся в широких пределах степенью графитизации будут играть роль твердой смазки, слой которой, образуется в процессе трения, и защищать поверхность покрытия, предотвращая ее износ.

### Литература

1. Левин И.С., Хрущов М.М., Марченко Е.А., Авдюхина В.М. // Влияние легирования на структуру и особенности трибологического поведения вакуумных алмазоподобных покрытий // Вестник Московского университета. 2016, Серия 3, Физика. Астрономия, №2, С.46-52.

## ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ, ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРА – ПРОИЗВОДНОГО ПОЛИФЕНИЛХИНОЛИНА

Саитов Ш.Р.<sup>1</sup>, Амасев Д.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

E-mail: saitsham@yandex.ru

Полимеры класса полифенилхинолина (ПФХ) обладают фотопроводимостью в области энергий квантов, больших 2.8 эВ [3]. В свою очередь, материалы, которые состоят из молекул, содержащих фрагмент 2,1,3-бензотиадиазола (БТДЗ), хорошо известны как органические полупроводники, имеющие относительно малое энергетическое расстояние (1.8 эВ) между уровнями высшей заполненной молекулярной орбитали и нижней свободной молекулярной орбитали [5]. В частности, было установлено, что создание смеси ПФХ с молекулами БТДЗ приводит к смещению края поглощения полученного композита ПФХ в красную область и возрастанию фототока в несколько раз [1].

В данной работе представлены результаты влияния отжига при температуре 150 °С на темновую проводимость ( $\sigma$ ) и спектральные зависимости фотопроводимости ( $\Delta\sigma$ ) и коэффициента поглощения ( $\alpha_{срм}$ ) полимера класса ПФХ, содержащего фениламинную мостиковую группу и фрагмент БТДЗ в качестве ароматического радикала в основной цепи. Исследованные образцы представляли собой плёнки ПФХ с толщинами от 0.1 мкм до 1 мкм, нанесённые на стеклянную подложку с помощью центрифугирования раствора ПФХ в трифторуксусной кислоте при комнатной температуре. Для проведения измерений на поверхность пленок были нанесены контакты из Al с расстоянием между ними 1 мм.

Измерения показали, что в области температур 294-380 К температурная зависимость  $\sigma$  исследованного материала может быть удовлетворительно описана как экспоненциальным законом  $\sigma(T) = A \exp[-E_a/(k_B T)]$  с энергией активации  $E_a \approx 0.8$  эВ (рис. 1а), так и законом Мотта  $\sigma(T) = B \exp[-(T_0/T)^{1/4}]$  [6] (рис. 2б). Активационная

зависимость  $\sigma(T)$ , представленная на рис. 1а, может возникать при переносе носителей заряда по делокализованным состояниям и при расположении уровня Ферми в запрещенной зоне на глубине 0.8 эВ от данных состояний в то время, как закон Мотта получен в [4] для прыжковой проводимости вблизи уровня Ферми с переменной длиной прыжка. По нашему мнению, в исследованном материале более вероятен прыжковый перенос носителей заряда по локализованным состояниям, о чем свидетельствуют результаты, представленные на рис. 1.

Проведенные измерения показали, что величина  $E_a$  не изменяется в результате отжига полимера. В тоже время, спектральные зависимости  $\Delta\sigma(h\nu)$  и зависимости  $\alpha_{срм}(h\nu)$ , представленные на рис. 2, указывают на изменение положения края фотопроводимости и поглощения и, соответственно, на увеличение ширины запрещенной зоны исследованного ПФХ от 1.85 эВ, до 2.1 эВ в результате его отжига. Полученные спектральные зависимости  $\alpha_{срм}(h\nu)$  хорошо описываются функциями Гаусса. Анализ показал, что край зависимости  $\alpha_{срм}(h\nu)$  до отжига хорошо аппроксимируется суперпозицией двух функций Гаусса с параметром ширины  $w \approx 0.12$  эВ, а после отжига – одной функцией Гаусса с  $w \approx 0.17$  эВ. Согласно [2], зависимость  $\alpha_{срм}(h\nu)$  определяется распределением плотности участвующих в генерации неравновесных носителей электронных состояний, которое в полимерных аморфных материалах, согласно [4], также описывается функциями Гаусса. Результаты анализа зависимостей  $\alpha_{срм}(h\nu)$  позволили получить оценку для ширины гауссовских пиков распределения плотности вносящих вклад в фотопроводимость электронных состояний, равную 0.14-0.24 эВ.

В работе проанализированы результаты влияния отжига на величину и спектральные зависимости фотопроводимости и коэффициента поглощения и предложен механизм, приводящий к увеличению оптической ширины запрещенной зоны исследованного полимера в результате его отжига.

Авторы выражают благодарность Тамееву А.Р. и Малову В.В. (ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН) за предоставление образцов для исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 16-29-06423).

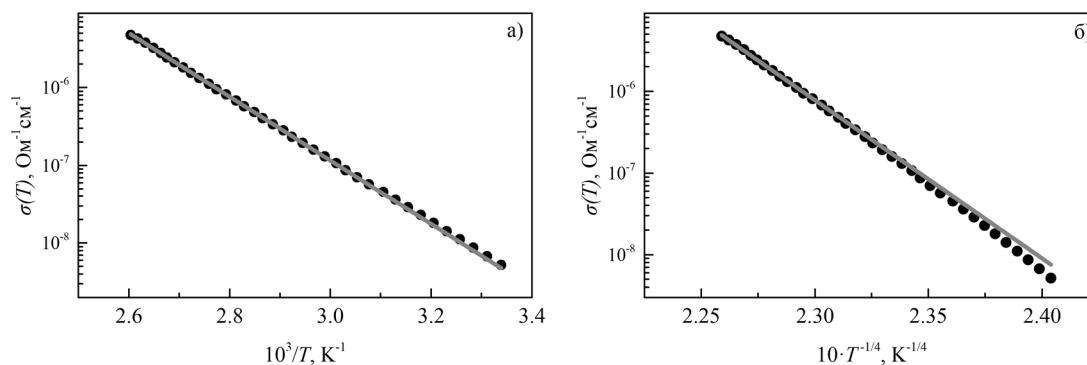


Рис. 1. Температурные зависимости темновой проводимости.

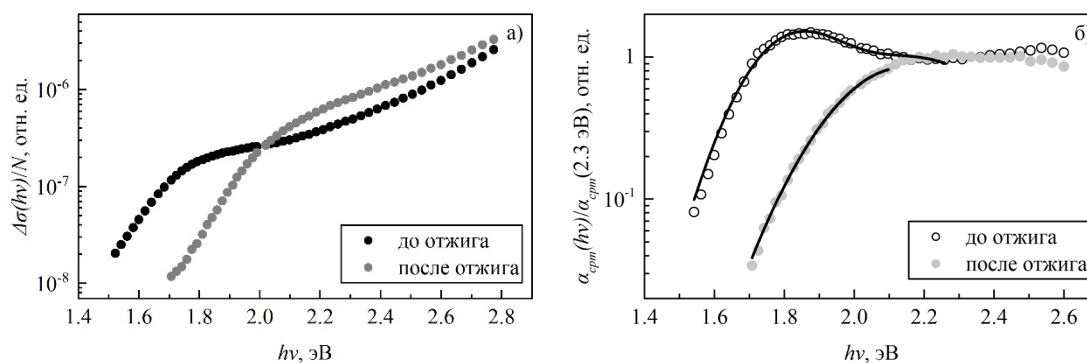


Рис. 2. Спектральные зависимости фотопроводимости, нормированной на число падающих квантов  $N$ , и коэффициента поглощения, нормированного на значение в точке  $h\nu = 2.3$  эВ.

**Литература**

1. Александрова Е.Л., Светличный В.М., Матюшина Н.В., Мягкова Л.А., Кудрявцев В.В., Тамеев А.Р. Сенсibilизация фотоэффекта в карбазол- и индолокарбазолсодержащих полифенилхинолинах акцепторными молекулами бензотиадиазола // ФТП. 2014. Т.48. № 11. С.1517-1520.
2. Малов В.В., Тамеев А.Р., Новиков С.В., Хенкин М.В., Казанский А.Г., Ванников А.В. Гауссова аппроксимация спектральной зависимости коэффициента поглощения в полимерном полупроводнике // ФТП. 2016. Т.50. № 4. С. 489-493.
3. Светличный В.М., Александрова Е.Л., Мягкова Л.А., Матюшина Н.В., Некрасова Т.Н., Смыслов Р.Ю., Тамеев А.Р., Степаненко С.Н., Ванников А.В., Кудрявцев В.В. Фото- и электрофизические свойства полифенилхинолинов, содержащих фрагменты карбазола или индоло[3,2-b]карбазола – новых материалов для оптоэлектроники // ФТП. 2011. Т.45. №10. С.1392-1398.
4. Campbell A.J., Bradley D.D.C., Lidzey D.G. Space-charge limited conduction with traps in poly(phenylene vinylene) light emitting diodes // J. Appl. Phys. 1997. **82**, N. 12. P. 6326–6342.
5. Inganäs O., Svensson M., Zhang F., Gadisa A., Persson N.K., Wang X., Andersson M.R. Lowbandgap alternating polyfluorene copolymers in plastic photodiodes and solar cells // Appl. Phys. A. 2004. V.79. N.1. P.31-35.
6. Mott N.F. Conduction in Non-Crystalline Materials. Oxford: Clarendon Press, 1987.128 с.

**ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ  $TmFe_{11}Ti$ , ЕГО ГИДРИДА И НИТРИДА В СИЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ**

Сладков А.Д.

*МГУ имени М.В.Ломоносова,  
физический факультет, Москва, Россия  
E-mail: a.d.sladkov@gmail.com*

Редкоземельные интерметаллические соединения с высоким содержанием железа являются основой для получения материалов для постоянных магнитов. Среди рекордсменов - состав  $Nd_2Fe_{14}B$ , в котором соотношение редкоземельного металла к железу  $R/Fe$  составляет 0.14. Однако в последние годы растущая стоимость редкоземельных металлов заставляет учёных и технологов искать сплавы с пониженным содержанием редкоземельных элементов. Такими сплавами являются, к примеру,  $RFe_{11}Ti$ , в которых это соотношение значительно меньше  $R/Fe = 0.09$ .

Изучение соединений типа  $R(Fe,T)_{12}$  начиналось в 90-е годы. Однако только в настоящее время ведутся активные работы как по исследованию их фундаментальных свойств, так и по получению на их основе ресурсосберегающих постоянных магнитов, обладающих необходимыми магнитными свойствами для их применения в различных областях промышленности.

Целью данной работы является уточнение значений параметров кристаллического и обменного поля соединения  $TmFe_{11}Ti$  его гидрида и нитрида, используя экспериментальные данные, полученные в высоких магнитных полях до 60 Тл и их сравнение с ранее полученными данными.

Для получения исходного состава проводились плавки с использованием дуговой электропечи фирмы Leubold-Heraeus. Гидрирование и азотирование изучаемых образцов было проведено прямой реакцией исходного образца с газами высокой чистоты  $H_2$  и  $N_2$  соответственно. Количество абсорбированного водорода и азота определялось разницей давления газа до и после реакции. Были получены составы  $TmFe_{11}TiH_1$  и  $TmFe_{11}TiN_1$ . Фазовый рентгеноструктурный анализ проводился на дифрактометре Ultima IV фирмы Rigaku с излучением  $CuK\alpha$



Структурные параметры помещены в Таблицу 1. Из представленных данных видно, что объём элементарной ячейки при гидрировании возрастает на 1%, в то время как при азотировании практически на 3%.

Таблица 1. Структурные параметры соединений  $TmFe_{11}Ti$ ,  $TmFe_{11}TiH$ ,  $TmFe_{11}TiN$

Соединение	$a$ , нм	$c$ , нм	$V$ , нм <sup>3</sup>	$\Delta V/V$ , %
$TmFe_{11}Ti$	8.4655	4.7794	342.5	0
$TmFe_{11}TiH$	8.5053	4.7789	345.7	0.9
$TmFe_{11}TiN$	8.5542	4.8157	352.4	2.8

Магнитные исследования проводились в статических магнитных полях до 14 Тл с использованием стандартного оборудования PPMS-14, а также в импульсных магнитных полях до 60 Тл в лаборатории сильных магнитных полей (г. Дрезден, Германия).

На рисунке 1 приведены полевые зависимости намагниченности, выполненные на свободных порошковых образцах в статических и импульсных магнитных полях.

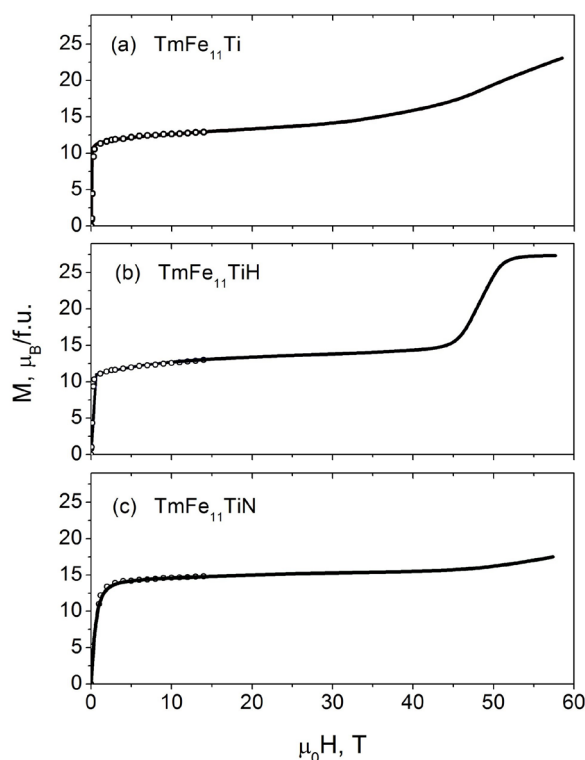


Рис.1. Кривые намагниченности  $TmFe_{11}Ti$ ,  $TmFe_{11}TiH$ ,  $TmFe_{11}TiN$  при 4.2 К в полях до 60 Тл (точки отражают измерения в статическом магнитном поле, линии – измерения в импульсных магнитных полях).

Благодаря особенностям кристаллической структуры данные соединения являются удобными модельными объектами. Теоретическая обработка экспериментальных кривых намагничивания для соединений  $RFe_{11}Ti$  проводилась в рамках модели одноионной анизотропии. Обменное взаимодействие между подрешётками редкой земли и железа рассчитывалось с помощью теории молекулярного поля. В случае соединения  $TmFe_{11}Ti$  и  $TmFe_{11}TiN$  выход на полное насыщение не наблюдается, в то время как в соединении  $TmFe_{11}TiH$  мы наблюдаем явление, которое получило название ферромагнетизм, индуцированный внешним магнитным полем.

Полный набор обменных и кристаллических параметров был получен в результате совпадения теоретических кривых и экспериментальными [1]. Данные о параметрах представлены в Таблице 2.

Таблица 2. Параметры кристаллического поля для  $TmFe_{11}Ti$  и его гидроксида

Соединение	$B_0^2$	$B_0^4$	$B_0^6$	$B_4^4$	$B_4^6$	$H_{ex}$
TmFe <sub>11</sub> Ti	-17.1	-2.21	43.92	-23.98	0	50.8
TmFe <sub>11</sub> TiH	-50.2	-40.02	43.92	-23.98	0	47.5

### Литература

1. Tereshina I.S., Kostyuchenko N.V., Tereshina-Chitrova E.A., Skourski Y., Doerr M., Pelevin I.A., Zvezdin A.K., Paukov M., Havela L., Drulis H. ThMn<sub>12</sub>-type phases for magnets with low rare-earth content: Crystal-field analysis of the full magnetization process // Scientific reports 8, 2018. С. 3595-3596

## ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ В МЁССБАУЭРОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ФАЗ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ [Fe(10ML)/V(10ML)]<sub>20</sub>

Слинько О.В., Баулин Р.А.

МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

E-mail: ovslinko@gmail.com

Мёссбауэровская (ядерно-резонансная) рефлектометрия позволяет исследовать магнитные тонкие пленки и многослойные структуры с разрешением по глубине <1 нм [1]. Метод реализуется с использованием узкоколлимированного синхротронного излучения (СИ), и селективность по глубине достигается варьированием угла скольжения. В последние годы, благодаря ядерной монохроматизации СИ, стало возможным измерять мёссбауэровские спектры зеркального отражения, что позволяет исследовать сверхтонкие параметры резонансных изотопов в пленках.

При исследованиях пленок с ультратонкими слоями (~1 нм) мёссбауэровские спектры отражения зачастую имеют сложный вид и плохо разрешены, а интерпретация данных представляет серьезную проблему. Для детерминирования результата поляризации анализ отраженного излучения, как показано в [2], очень эффективен.

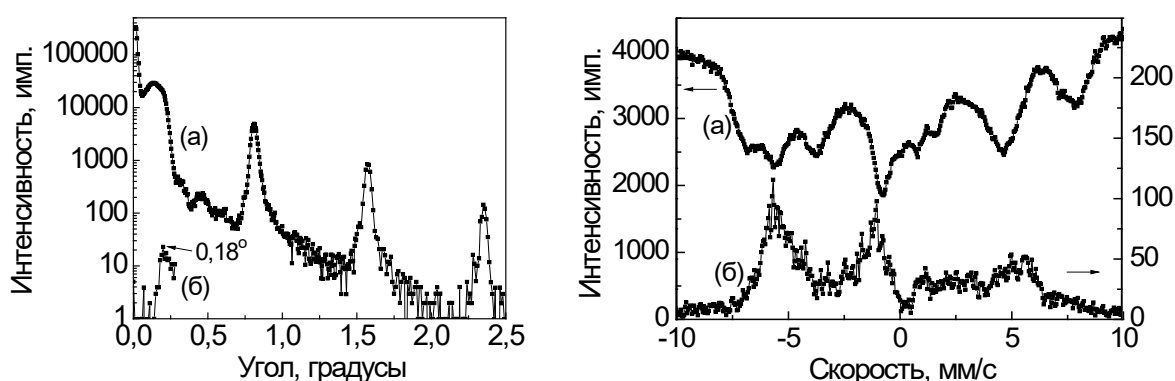


Рис.1. Угловые зависимости интенсивности ядерно-резонансной рефлектометрии в функции угла скольжения (слева) и мёссбауэровские спектры отражения при угле скольжения  $\theta=0.18^\circ$  (справа) от структуры [Fe(10ML)/V(10ML)]<sub>20</sub> Образец при температуре 4 К. Слева: внешнее магнитное поле 1 Тл и кривая без анализа поляризации (а) и 5 Тл, а кривая с селекцией  $\pi \rightarrow \sigma'$  отраженного излучения (б). Справа: внешнее магнитное поле 1 Тл и спектр без анализа поляризации (а) и с селекцией  $\pi \rightarrow \sigma'$  отраженного излучения (б).

Эксперимент был проведен на станции ID18 Европейского синхротрона (ESRF) с использованием синхротронного мёссбауэровского источника (SMS – Synchrotron Mössbauer Source [3]), дающего  $\pi$ -поляризованное излучение. Исследовалась много-

слоистая структура  $[^{57}\text{Fe}(10\text{ML})/\text{V}(10\text{ML})]_{20}$ . Образец был помещен в криостат и охлажден до температуры 4 К. Анализ поляризации отраженного излучения осуществлялся при помощи кристалла LiF, (622) отражение от которого соответствует  $2\theta_{\text{В}}=89.964$  для резонансного излучения 0.086 нм.

Были измерены угловые зависимости ядерно-резонансной рефлектометрии (как интеграл по мёссбауэровскому спектру отражения) без анализа поляризации и с анализом  $\pi \rightarrow \sigma'$  отраженной интенсивности (Рис. 1, слева). Кривая  $\pi \rightarrow \sigma'$  имеет характерный пик в критическом угле, согласующийся с теорией, развитой в [2].

На Рис. 1 (справа) представлены мёссбауэровские спектры отражения без анализа поляризации (а) и с анализом  $\pi \rightarrow \sigma'$  поляризации (б), измеренные в максимуме кривой  $\pi \rightarrow \sigma'$  на Рис. 1(слева) (при угле скольжения  $\theta=0.18^\circ$ ). Образец был намагничен во внешнем магнитном поле 1 Т вдоль пучка синхротронного излучения, чтобы дихроичный эффект в отражении был максимален.

Спектр без анализа поляризации имеет много пиков и характеризует наличие разных фаз в поверхностном слое образца. Идентификация разных пиков оказалась возможной только после сравнения этого спектра со спектром  $\pi \rightarrow \sigma'$  отражения. Этот спектр должен содержать только дихроичные 1,3,4, и 6 линии спектра для выстроенной ферромагнитной фазы. Этот спектр соответствует сверхтонкому полю  $B_{\text{hf}} \approx 34$  Тл, характерному для  $\alpha$ -Fe. Уширение линий характерно для ультратонких пленок, в которых окружение ядер  $^{57}\text{Fe}$  неоднородно. Линии, не проявляющиеся в этом спектре, могут соответствовать антиферромагнитной фазе (по-видимому, это окисел  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  со средним сверхтонким полем  $B_{\text{hf}} \approx 45$  Тл). Антиферромагнитное упорядочение не может быть разрушено внешним полем 1 Тл, а круговой дихроизм для мёссбауэровских компонент при таком упорядочении отсутствует и  $\pi \rightarrow \sigma'$  рассеяние не возникает.

Авторы выражают благодарность научному руководителю М.А. Андреевой (МГУ) за предоставление программ обработки экспериментальных данных и обсуждение результатов, А.И. Чумакову (ESRF), Д. Бессасу (ESRF), Д.А. Пономареву (ИФМ УрО РАН) за помощь в эксперименте, Л. Хаггстрему (Uppsala university) за предоставление образца, А. Рогалева (ESRF) за предоставление кристалла-анализатора.

### Литература

1. Andreeva M.A., Baulin R.A., Chumakov A.I., Ruffer R., Smirnov G.V., Babanov Yu.A., Devyaterikov D.I., Milyaev M.A., Ponomarev D.A., Romashev L.N., Ustinov V.V. Nuclear resonance reflectivity from  $[^{57}\text{Fe}/\text{Cr}]_{30}$  multilayer with the Synchrotron Mössbauer Source // J. Synchrotron Rad. 2018. V. 25. p.473–483.
2. Andreeva M. A., Baulin R. A., Chumakov A. I., Kiseleva T. Yu, and Ruffer R. Polarization analysis in Mössbauer reflectometry with synchrotron Mössbauer source. // Condensed Matter. 2019.V. 4 (1):1–17.
3. Potapkin V., Chumakov A.I., Smirnov G.V., Celse J.-P., Ruffer R., McCammon C., Dubrovinsky L. The 57Fe Synchrotron Mössbauer Source at the ESRF // J. Synchrotron Rad. 2012. V. 19. p.559–569.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В КОЛЛИМАТОРЕ МОЛИБДЕН-АЛМАЗ $\text{MoCuCD}$ , ОБЛУЧЕННОМ 35 МЭВ ПУЧКОМ ПРОТОНОВ

Случевский А.Ю., Рязанов А.И.

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: tommyjkee@gmail.com

Практически все материалы, из которых изготавливаются различные конструктивные узлы и рабочие части атомных и термоядерных установок, как исследовательских, так и промышленных, подвергаются воздействию излучений и радиационному воздействию различных высокоэнергичных частиц [6] во время их работы. Излучения, воз-

действуя на материалы, изменяют их структуру, а значит, и их прочностные, электрические и другие свойства [1]. Чтобы понять физические механизмы радиационной стойкости материалов ОРВ, необходимо провести испытания на облучение различными быстрыми частицами и исследовать изменения микроструктуры и механических свойств при различных температурах облучения и дозах [2-5].

Представлены результаты облучения материалов коллиматоров молибден-алмаз различных установленных размеров на циклотроне НИЦ-КИ при различных дозах при комнатной температуре для измерений теплопроводности, коэффициента теплового расширения КТР ( $\alpha$ ), удельной теплоёмкости расширения ( $\lambda$ ) и удельного электросопротивления ( $\rho$ ) данных облученных материалов.

Проводилось облучение материалов коллиматоров молибден-алмаз протонами до 35 МэВ на циклотроне НИЦ-КИ при низкой температуре (ниже 100 °С) и различных дозах:  $\Phi_1 = 10^{17}$  p/cm<sup>2</sup>,  $\Phi_2 = 10^{18}$  p/cm<sup>2</sup>. Температура измерения не превышала температуру облучения, чтобы не отжечь накопившиеся в образце радиационные дефекты, поэтому после первого облучения измерения проводились только до температуры 120 °С. После второго облучения измерения проводились до 200 °С.

Для оценки скорости образования дефектов и пробегов протонов в облучаемых материалах была использована программа SRIM-2008. Поскольку оба материала являются неоднородными, их повреждаемость была оценена двумя способами: по средней плотности материала и для материала, представляющего собой чередующиеся слои металла и алмаза в направлении, перпендикулярном распространению заряженных частиц. Последний подход обусловлен тем, что протоны высоких энергий в процессе распространения в материалах слабо отклоняются от исходного направления, так как расходуют энергию преимущественно на ионизацию.

Так как пробег протонов в молибденовом композите составляет порядка 2 мм, образцы облучались с двух сторон поочередно. Равномерность дозы в зоне облучения контролировалась после облучений по величине гамма фона наведенной активности. Исходя из оценки величины пробега (2 - 2.5 см) в облучаемых материалах для протонов с энергией 35 МэВ, что свидетельствует о большом числе таких слоев, факт первоначального попадания протонов в тот или иной слой не учитывался.

Для облучения при каждой дозе НИЦ-КИ использовались три различных образца молибден-алмаз (на одну точку) для изменения теплопроводности ( $\lambda$ ) облученных образцов молибден-алмаз цилиндрической формы с диаметром 10 мм и толщиной 4 мм.

Были проведены исследования образцов после 1-го и 2-го облучения быстрыми протонами для измерения величины коэффициента термического расширения КТР ( $\alpha$ ). Для изменения коэффициента теплового расширения и удельной теплоёмкости облученных образцов использовались образцы молибден-алмаз цилиндрической формы с диаметром 8 мм и толщиной 4 мм. Необлученные образцы измерялись подобным образом.

Величина удельного электросопротивления ( $\rho$ ) образцов медь-молибден-алмаз измерялась методом «ампер-вольтметра». При этом методе на торцы образца подавалось напряжение через токовые концы, а измеряемое напряжение снималось с боковой поверхности образца через потенциальные концы, расположенные на расстоянии 9,4 мм друг от друга. Измерения проводились на 3-х образцах молибден-алмаз с формой параллелепипеда размерами: 60 мм x 5.5 мм x 4 мм при комнатной температуре.

Было установлено, что температуропроводность ( $\lambda$ ) материала молибден-медь-алмаз существенно ниже, чем материала медь-алмаз (примерно в полтора раза). Так, при температуре измерения 200 °С они равны 40-45 мм<sup>2</sup>/с и 55-95 мм<sup>2</sup>/с соответственно.

Установлено, что в исходном состоянии величина удельного электросопротивления образцов значительно отличается – от  $8,5 \cdot 10^{-8}$  Ом·м до  $11,0 \cdot 10^{-8}$  Ом·м. Значение удельного электросопротивления образцов медь-молибден-алмаз после облучения увеличилось на 30-50 %. Кроме того, замечено, что величина удельного электросопротивления

образцов медь-алмаз значительно ниже, чем образцов медь-молибден-алмаз – примерно на порядок.

### Литература

1. Александров А.С. и др. // ФТТ. 1979. Т. 21. N 7. С. 2062–2072.
2. Allen T.R., Gan J., Cole J.I., Miller M.K., Busby J.T., Shutthanandan S., Thevuthasan S. // J. Nucl. Mater. 375 (2008) 26–37.
3. Lindau R., Klimenkov M., Jäntschi U., Möslang A., Commin L. // J. Nucl. Mater. 416 (2011) 22–29.
4. Materna-Morris E., Möslang A., Rolli R., Schneider H.-C. // J. Nucl. Mater. 386–388 (2009) 422–425.
5. Monnet I., Dubuisson P., Serruys Y., Ruault M.O., Kaitasov O., Jouffrey B. // J. Nucl. Mater. 335 (2004) 311–321.
6. Weber H.W. // Int. J. Modern Phys. 2011. V. E20. P. 1–47.

## ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ СЕНСОР ДЛЯ БЛИЖНЕГО ИНФРАКРАСНОГО ДИАПАЗОНА НА ОСНОВЕ InP/InGaAs ФОТОКАТОДА

Смирнов К.Я.

*СПбГУТ имени профессора М. А. Бонч-Бруевича, Санкт-Петербург, Россия*  
*E-mail: konstantinsmirnov10@gmail.com*

В настоящее время наблюдается потребность в создании гибридных телевизионных модулей ближнего инфракрасного диапазона для комплексов слежения и обнаружения целей. Основной составляющей таких модулей является фотоэлемент, чувствительный в спектральном диапазоне 0.9–1.7 мкм. Для обеспечения высоких технических параметров, необходимых в системах специального назначения, в качестве фотоэлемента может быть использован сенсор на основе гибридной технологии, которая предполагает реализацию в одном вакуумном объёме системы катод-анод, с приложением между ними высоких ускоряющих напряжений [1]. Предложенная конструкция фотодетектора позволяет за счет внутреннего усиления получить уровень чувствительности в заданном спектральном диапазоне при низком уровне шумов выше, чем у различных итераций твердотельных InGaAs-структур, используемых в существующих приборах.

Целью работы явилась разработка и реализация фоточувствительного сенсора с InP/InGaAs гетероструктурой в качестве фотокатода и электронно-чувствительной ПЗС в качестве преобразователя фотоэлектронов – анода.

Усиление прибора достигается путем приложения больших напряжений на участок катод-анод (детектор фотоэлектронов), что позволяет передать электронам энергию в несколько килоэлектрон-вольт. “Разогнанные” фотоэлектроны далее тормозятся в слое твердотельного детектора фотоэлектронов, порождая электронно-дырочные пары, что позволяет получить внутреннее усиление в приборе до  $10^3$  раз.

На основе проведенных исследований был создан фотокатод, представляющий собой гетероструктуру InP/InGaAs, выращенную на подложке InP [2]. На поверхность гетероструктуры методом фотолитографии нанесен поверхностный электрод, что характерно для фотокатодов с тянущим полем (TEP) [3,4]. Электрод, нанесенный на активную область фотокатода, представлял собой восемь окон с различной частотой линий сетки. Расстояние между соседними линиями варьировалось от 2 до 12 мкм. Подобный дизайн объясняется необходимостью экспериментальным путем выявить оптимальную скважность для электрода, который будет использоваться в дальнейших макетах и покрывать всю активную область фотокатодной структуры. На рисунке 1 показан фрагмент изображения, полученного в результате испытаний макета прибора с InP/InGaAs фотокатодом и электронно-чувствительной ПЗС матрицей (ЕВССД). Изображение соответствует электроду со скважностью 6 и 8 мкм.

При комнатной температуре, в пассивном режиме (без стробирования) при непрерывном облучении измерена пороговая облученность на уровне  $5 \cdot 10^{-8}$  Вт/см<sup>2</sup> для  $\lambda=1-1,5$  мкм. Эксперимент показал, что оптимальная скважность электрода находится в пределах 6–8 мкм.

На основе полученных экспериментальных результатов был разработан опытный макет гибридного телевизионного сенсора для ближнего инфракрасного диапазона. В ходе первичных испытаний подтверждена возможность обнаружить с использованием этого прибора в условиях плохой видимости объект, а по полученному изображению его идентифицировать.

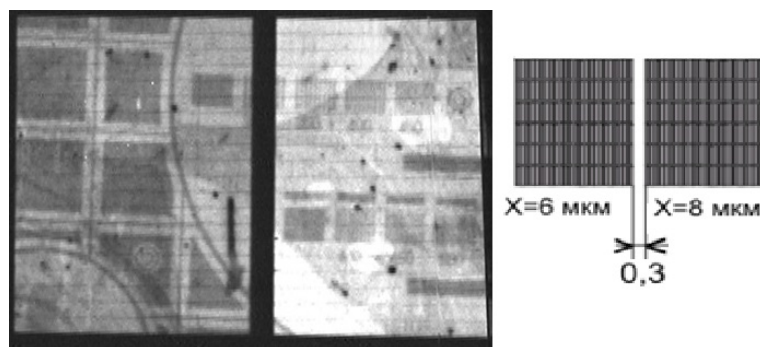


Рис. 1. Фрагмент изображения, полученного через тест-таблицу на разработанном сенсоре в пассивном режиме.

Улучшение параметров разработанного прибора может быть достигнуто путем оптимизации методов довакуумной химической очистки гетероструктур InP/InGaAs, создания фотошаблона для титанового сетчатого электрода с оптимальными параметрами скважности сетки и толщины напыления, разработки системы вакуумного отжига для обеспечения равномерного нагрева всей активной области фотокатодной структуры.

### Литература

1. Aebi V.W., Sykora D.F., Jurkovic M.J., Costello K.A. Multichannel Intensified Photodiode for Near Infrared Single Photon Detection. // Proc. of SPIE, 2011, v. 8033, 80330T
2. Смирнов К.Я. Фотокатод на основе гетероструктур InP/InGaAs для фоточувствительных сенсоров ближнего инфракрасного диапазона. // Сборник тезисов «Ломоносов – 2018», 2018, с.331 - 332.
3. Смирнов К.Я., Медзаковский В.И. Высокоэффективный фотоэмиттер на основе фосфида индия для фотокатода InP/InGaAs. // Сборник тезисов «Ломоносов – 2017», 2017, с.686 - 687.
4. Myazin N. S., Smirnov K. J., Davydov V. V., Logunov S. E. Spectral characteristics of InP photocathode with a surface grid electrode. // Journal of Physics: Conference Series, 2017, 929 012080

### УГЛОВАЯ И ДОЗОВАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА РАСПЫЛЕНИЯ КРЕМНИЯ ФОКУСИРОВАННЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ ГАЛЛИЯ

Смирнова М.А.<sup>1</sup>, Пухов Д.Э.<sup>2</sup>, Бачурин В.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ЯрГУ имени П.Г. Демидова, Ярославль, Россия

<sup>2</sup>ЯФ ФТИАН РАН им. К.А. Валиева, Ярославль, Россия

E-mail: masha\_19957@mail.ru

В работе представлены экспериментальные результаты по изучению угловой и дозовой зависимостям распыления Si фокусированным ионным пучком (ФИП) Ga. Несмотря на то, что процесс распыления исследуется достаточно давно и получен боль-

шой объем экспериментальных и теоретических результатов, выяснилось, что бомбардировка образцов фокусированными пучками (диаметр порядка 10 нм) имеет существенные особенности, требующие их исследования [1]. В частности, имеется всего несколько работ, посвященных изучению угловой зависимости коэффициента распыления Si ионами Ga<sup>+</sup> [2]. В то же время ФИП находят широкое применение формирования микро- и наноструктур на поверхности с высоким аспектным отношением линейных размеров к глубине.

Эксперименты по распылению Si ионами Ga с энергией 30 кэВ проводились на установке Quanta 3D 200i от FEI™. Диаметр пучка составлял 66 нм, ток 3 нА, угол падения изменялся от 0° до 80°. Доза облучения от 10<sup>17</sup> до 10<sup>18</sup> ион/см<sup>2</sup>. На поверхности формировались растры размером 30×13 мкм<sup>2</sup>. С помощью электронного микроскопа прибора определялись размеры кратеров распыления и вычислялся его объем. Коэффициент распыления определялся по формуле (1):

$$Y = \frac{\rho \cdot V \cdot N_A \cdot e}{M \cdot I \cdot t} \quad (1)$$

Были получены значения коэффициентов распыления. При нормальном падении  $Y=2,5$  ат./ион дозе  $2 \times 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup>, что хорошо согласуется с имеющимися данными [2]. Погрешность измерений не превышала 10% при больших углах падения.

В докладе приведено подробное обсуждение полученных результатов на основании известных механизмов распыления.

### Литература

1. А.В. Румянцев, Н.И. Боргардт, Р.Л. Волков. Моделирование распыления вторично осажденного кремния при воздействии фокусированным ионным пучком // Поверхность. 2018, №6. С. 102-107.
2. S. Lindsey, G. Hobler Sputtering of Silicon at glancing incidence // NIMB. 2013, Vol.303. P. 142-147.

## РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЕ И МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ТРИГОНАЛЬНЫХ ФЕРРОБОРАТОВ

Снегирёв Н.И.<sup>1</sup>, Селезнева К.А.<sup>1</sup>, Могиленец Ю.А.<sup>1</sup>,  
Смирнова Е.С.<sup>2</sup>, Старчиков С.С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «КФУ им. В.И.Вернадского», ФТИ, Симферополь, Россия

<sup>2</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

E-mail: niksnegir@yandex.ru

Ферроборат FeVO<sub>3</sub> – известный материал, который имеет ряд перспективных высокотехнологических приложений. Предложенный нами модернизированный раствор-расплавный метод позволяет получать высококачественные монокристаллы FeVO<sub>3</sub> [1], которые являются ключевым элементом в монохроматорах при проведении экспериментов по ядерно-резонансному рассеянию с использованием синхротронного излучения [2].

Изоморфное замещение части ионов железа в матрице FeVO<sub>3</sub> атомами других металлов позволяет создать кристаллы с отличными от «чистого» ферробората свойствами. В частности, с помощью внедрения в структуру диамагнитных ионов галлия можно целенаправленно понижать значение точки Нееля, оптимизируя параметры работы таких монохроматоров.

В данной работе в результате ростовых экспериментов раствор-расплавным методом синтезирована серия монокристаллов Fe<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>VO<sub>3</sub>. Кристаллы представляли собой базисные пластинки с линейными размерами до 5-7 мм и толщиной до 0.06-0.09 мм.

Методом рентгеноструктурного анализа определена и уточнена структурная модель монокристаллов Fe<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>VO<sub>3</sub>. Получены мёссбауэровские спектры (см. Рис. 1) и

определены параметры сверхтонкой структуры монокристаллов ферро-галло-боратов. Установлено, что при фиксированной температуре спектр состоит из магнитной компоненты (секстета), которая с увеличением концентрации диамагнитной примеси трансформируется в парамагнитный дублет. Обнаружено, что образцы  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$  с концентрацией галлия  $x \geq 0.82$  не обладают магнитным упорядочением во всем исследованном диапазоне температур (10-300 К).

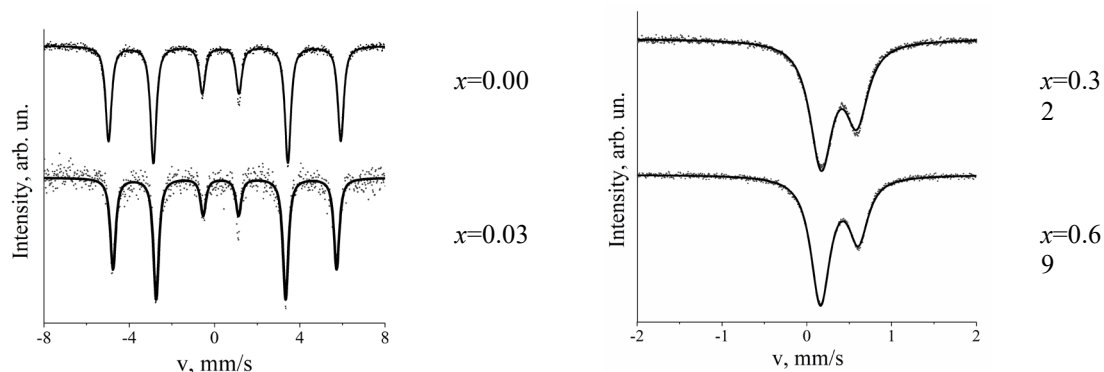


Рис. 1. Мёссбауэровские спектры монокристаллов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ , полученные при  $T=300$  К.

Подобные материалы представляют значительный интерес и могут найти уникальное применение в синхротронных технологиях третьего и четвертого поколения.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ и Совета Министров РК, № 18-42-910008 «р\_а», и РФФИ, №18-32-00210 «мол\_а» (модернизация лабораторной ростовой установки), а также Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» в части мёссбауэровской спектроскопии и рентгеновских исследований.

Авторы выражают благодарность М.Б. Стругацкому, С.В. Ягупову, О.А. Алексеевой и И.С. Любутину за значительную помощь в проведении работы.

### Литература

1. Yagupov S. et al. Development of synthesis technique and characterization of high-quality iron borate  $\text{FeBO}_3$  single crystals for applications in synchrotron technologies of a new generation // Cryst. Growth Des. 2018. №18 (12). p. 7435-7440.
2. Potapkin V. et al. The  $^{57}\text{Fe}$  Synchrotron Mossbauer Source at the ESRF // J. Synchrotron Rad. 2012. №19. p. 559-569.

## СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ СИЛИЦИДА КОБАЛЬТА, ПОЛУЧЕННЫХ ПУТЕМ СПЛАВЛЕНИЯ ДВУХ ФАЗ

Сорокина А.Е.

*РХТУ имени Д.И.Менделеева, Москва, Россия*

*E-mail: squirrell@gmail.com*

Ежегодное увеличение общемирового энергопотребления подталкивает ученых к поиску новых источников энергии и, в особенности, к возобновляемым, или регенеративным источникам энергии. Среди таких источников энергии особое место занимают кристаллы с термоэлектрическими свойствами, в которых возникает ЭДС при приложении разности температур к разным концам кристалла. Наилучшими термоэлектрическими свойствами обладают полупроводниковые соединения, которые обладают низкой тепло- и высокой электропроводностью. Силицид кобальта- перспективный термоэлектрический материал обладающий высоким фактором термоэлектрической мощности  $S^2 \sigma = 5 * 10^{-4} \text{ В}^2 \cdot \text{М}^{-1} \cdot \text{К}^{-2}$ . Как известно кремний является базовым материалом для современных полупроводниковых технологий. Моносилицид кобальта- полупровод-



ник с n-типа проводимостью, обладающий хорошими транспортными свойствами, и являющийся перспективным материалом для дальнейшего изучения.[1] CoSi<sub>2</sub> и Co<sub>2</sub>Si-проводники с разными типами проводимости (n и p), и что бы обеспечить преобладание n-типа проводимости, необходим контроль фазового состава.

Известный синтез кристаллов силицида кобальта методом направленной кристаллизации достаточно трудоемкий и дорогостоящий, поэтому поиск новых методов синтеза является актуальной проблемой. Данные образцы, кристаллы CoSi<sub>0.699</sub> и CoSi<sub>1.126</sub>, были синтезированы в лаборатории термоэлектрических материалов Физико-технического института им А.Ф., методом прямого сплавления.

Морфология поверхности кристаллов, а так же элементный анализ были исследованы на сканирующем электронном микроскопе Quanta 200 3D FEI. Фазовый анализ образцов был проведен на рентгеновском дифрактометре Rigaku Miniflex 600

Рентгено-фазовый анализ (порошкограмма) подтвердил наличие в слитках дополнительных фаз Co<sub>2</sub>Si и CoSi<sub>2</sub>. Но с помощью РФА невозможно определить размеры и форму зерен, точный состав фаз, и анализ в конкретной точке, поэтому более детально образцы были исследованы с помощью сканирующей микроскопии.

Результаты сканирующей микроскопии показали, что в структуре кристалла находятся вытянутые, продолговатые зерна Co<sub>2</sub>Si в первом образце и CoSi<sub>2</sub> во втором, размером порядка 250-300 микрон в длину, и 50-100 в ширину, не имеющие определенного направления, так как при синтезе не использовались методы направленного роста. Это позволяет сделать вывод, что полученные образцы двухфазны.

Термоэлектрические свойства этих двух фаз различаются:

CoSi<sub>0.699</sub>:  $\sigma=15000$ ; CoSi<sub>1.126</sub>:  $\sigma=7400$ .

#### Литература

1. M.I. Fedorov, V.K. Zaitsev. Thermoelectric Handbook: Macro to Nano. Ed. By D.M. Rowe. 31.1-31.19, 2006.

### СТРУКТУРНЫЕ, МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА МУЛЬТИФЕРРОИКА СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА Ba<sub>3</sub>NbFe<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>14</sub> ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ ДО 70 ГПа ПО ДАННЫМ СИНХРОТРОННОЙ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Старчиков С.С.<sup>1,2</sup>, Никифорова Ю.А.<sup>1,2</sup>, Аксёнов С.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт ядерных исследований РАН, Москва, Троицк, Россия

E-mail: sergey.s.starchikov@gmail.com

Железосодержащие кристаллы семейства лангасита A<sub>3</sub>MFe<sub>3</sub>X<sub>2</sub>O<sub>14</sub> (A = Ba, Sr; M = Sb, Nb, Ta; X = Si, Ge) представляют собой новый класс мультиферроиков, в которых сегнетоэлектричество может быть индуцировано магнитным упорядочением.[1-4]

Ba<sub>3</sub>NbFe<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>14</sub> (BNFS) имеет слоистую кристаллическую структуру (пр.гр. P321, Z=1), в которой ионы Fe<sup>3+</sup> и Si<sup>4+</sup> занимают 3f и 2d тетраэдрические узлы в плоскости ab соответственно. Согласно данным нейтронной дифракции обнаружена треугольная 120°-конфигурация трех спинов атомов железа в кристаллографической плоскости (ab) поворачивающаяся в соседних плоскостях (ab) по спирали вдоль кристаллографической оси c с периодом около 7 атомных слоев. При этом температура магнитного перехода T<sub>N</sub>=27 К.(рис.1.)

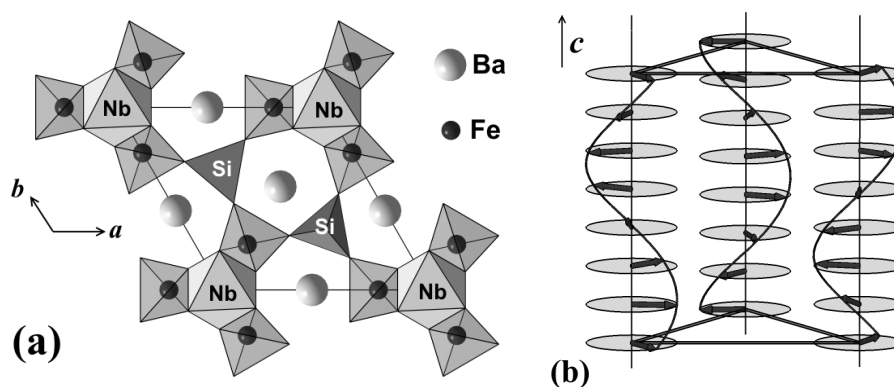


Рис. 1. (а) Проекция кристаллической структуры  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  на плоскость  $(ab)$ . Ионы  $\text{Fe}^{3+}$  расположены в кислородных тетраэдрах 3f и образуют треугольную магнитную решетку в плоскости  $(ab)$ . (б) Спиральное упорядочение магнитных моментов Fe при синхронном вращении трех спинов Fe на угол около  $51^\circ$  в соседних слоях при перемещении вдоль оси  $c$ . Семь шагов вдоль поворота приводят к периоду магнитной спирали.

В данной работе для кристаллов BNFS исследованы структурные и магнитные свойства при воздействии высоких гидростатических давлений (до 70 ГПа), создаваемых в камерах с алмазными наковальнями, при температурах от 4.2 до 300 К. Помимо лабораторных методик, использованы синхротронная мёссбауэровская спектроскопия (Synchrotron Mossbauer Source). Обнаружен каскад структурных фазовых переходов в области  $P = 3, 18$  и 45 ГПа. Наиболее резкие изменения структуры и магнитных свойств наблюдаются при втором переходе около 18 ГПа, где сильно уменьшается параметр  $c$  элементарной ячейки, и объем ячейки падает скачком на 7 %. Мёссбауэровские исследования при низких температурах показали, что этот переход значительно изменяет магнитные свойства кристалла. В частности нами обнаружено колоссальное увеличение точки Нееля до 100 К, что почти в четыре раза превышает соответствующее значение при атмосферном давлении (27 К).[5]

Авторы выражают благодарность проф. д.ф.-м.н. И.С. Любутину, д.ф.-м.н. М.А. Чуеву, к.ф.-м.н. А.Г. Гаврилюку, к.ф.-м.н. И.А. Трояну, к.х.н. А.Г. Ивановой за руководство и значительную помощь в проведении работы. Синхротронные исследования были выполнены на станции ID18 (Nuclear Resonance Beamline) ESRF, Гренобль, Франция.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ (грант # 16-12-10464), РФФИ (грант #17-02-00766).

### Литература

1. Kimura T., et al., Magnetic control of ferroelectric polarization // Nature, 2003.V.426.P.55
2. Khomskii D.I., Trend: Classifying multiferroics: Mechanisms and effects // Physics, 2009. V.2. P. 20.
3. Pikin S.A. and Lyubutin I.S., Phenomenological model of multiferroic properties in langasite-type crystals with a triangular magnetic lattice // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. P.064414.
4. Lyubutin I.S., et.al. Structural and magnetic properties of the iron-containing langasite family  $\text{A}_3\text{MFe}_3\text{X}_2\text{O}_{14}$  ( $\text{A} = \text{Ba}, \text{Sr}; \text{M} = \text{Sb}, \text{Nb}, \text{Ta}; \text{X} = \text{Si}, \text{Ge}$ ) observed by Mössbauer spectroscopy // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 214425.
5. I. S. Lyubutin, et.al. High pressure magnetic, structural, and electronic transitions in multiferroic  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  // Appl. Phys. Lett. 2018. V.112. P. 242405

## ВЛИЯНИЕ ПЬЕЗОЭФФЕКТА НА ПРОВОДИМОСТЬ НИЗКОРАЗМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ

Степушкин М.В.

*ФирЭ им. В.А. Котельникова РАН, Фрязино, Россия*

*E-mail: СОКРОВАЕНЕУ@yandex.ru*

Важным этапом в процессе исследования низкоразмерных полупроводниковых структур является изготовление омических контактов, сохраняющих работоспособность до субгелиевых температур [1]. Для измерения их характеристик традиционно применяется метод передающей линии (TLM). Использование данного метода предполагает, что все контакты одинаковы и не влияют на характеристики проводящего слоя за исключением, возможно, небольшой приконтактной области.

При проведении подобных экспериментов с гетероструктурой GaAs/AlGaAs с двумерным электронным газом нами наблюдалась аномальная зависимость сопротивления зазора от его длины. При охлаждении ниже 100 К сопротивления более коротких зазоров сильно возрастали и превышали сопротивления более длинных, при этом их вольт-амперные характеристики оставались линейными. Аналогичное явление описано в [2]. Возможным объяснением этого является наличие пьезоэлектрического эффекта. За счет различия коэффициентов теплового расширения металла и полупроводника возникают механические напряжения, приводящие к возникновению пьезопотенциала, влияющего на концентрацию свободных носителей заряда. Расчеты в соответствии с традиционной моделью [3], не учитывающей влияния пьезоэффекта за пределами канала, показали, что уменьшение сопротивления с увеличением расстояния между контактами возможно только в узком диапазоне расстояний, на несколько порядков меньшем, чем в экспериментальной структуре. Было сделано предположение о наличии существенного влияния пьезозарядов, возникающих во всем объеме полупроводника, на проводимость канала. Соответствующие расчеты подтвердили возможность существования диапазона длин зазоров, в котором при определенных параметрах структуры сопротивление уменьшается с увеличением длины. Таким образом, в структурах GaAs/AlGaAs обнаружено значительное влияние пьезоэффекта, которое необходимо учитывать при проектировании приборов микро- и нанoeлектроники.

### Литература

1. С.П. Курочка, М.В. Степушкин, В.И. Борисов Особенности создания омических контактов к гетероструктурам GaAs/AlGaAs с двумерным электронным газом // Известия вузов. Материалы электронной техники. 2016. Т. 19, No 4 с. 244 — 250
2. Oktay Göktaş, Jochen Weber, Jürgen Weis, Klaus von Klitzing. Alloyed ohmic contacts to two-dimensional electron system in AlGaAs/GaAs heterostructures down to submicron length scale // Physica E 40 (2008) 1579–1581
3. Shin-Shien Lo, Chien-Ping Lee // IEEE Trans. on Electron Devices. vol.ED-37. NO.10, (1990)

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИКРИСТАЛЛА АЛМАЗА, СОСТОЯЩЕГО ИЗ ЗЕРЕН, СОЕДИНЁННЫХ ЧЕРЕЗ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА СО СТРУКТУРОЙ ЛОНСДЕЙЛИТА

Суханова Е.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ФГБНУ «ТИСНУМ», Москва, г. Троицк, Россия

<sup>2</sup>МФТИ (НИУ), Долгопрудный, Россия

*Email: yekaterina.sukhanova@phystech.edu*

Алмаз – это уникальный кристалл, обладающий целым рядом выдающихся свойств. Так, он обладает рекордной твердостью, низким коэффициентом сжимаемости и высо-

кой теплопроводностью. В настоящее время алмазы используются практически во всех отраслях, в том числе в медицине, промышленности, микроэлектронике и даже в строительстве. Однако взаимодействие с железом при высоких температурах и горение в кислородной атмосфере делают невозможным использование алмазов для обработки сталей. Таким образом, поиск новых твердых и сверхтвердых материалов является одной из приоритетных задач современного материаловедения.

Известно, что характеристики поликристалла зависят от размера кристаллитов, от толщины и типа границы раздела между зернами. Из соотношения для прямого эффекта Холла-Петча [1] следует, что при уменьшении характерного размера структуры следует ожидать увеличение твердости. Таким образом, перспективным материалом выступает поликристалл алмаза, состоящий из зерен размером 1 - 250 нм. Действительно, ранее было проведено исследование образцов нанополукристалла алмаза, полученных из поликристаллического графита (> 99,99%) при давлении 12-16 ГПа и температуре 1900-2300°C. Было установлено, что данные образцы обладают твердостью, превышающей твердость монокристалла алмаза [2]. В работе [3] были исследованы поликристаллы алмаза с дефектами двойникования. Измерение твердости образцов по Виккерсу и Кнупу показало значения 175-203 ГПа и 168-196 ГПа соответственно, что превышает твердость монокристалла алмаза.

В данной работе было проведено предсказание возможной атомной структуры кристаллитов алмаза соединенных в поликристалле через границы раздела со структурой лонсдейлита. Квантово-механические расчеты были выполнены с помощью метода функционала электронной плотности (DFT), реализованного в программном пакете VASP.

Были найдены возможные плоскости соединения структур алмаза и лонсдейлита, исследована зависимость оптимальной формы кристаллитов данного поликристалла от внешних параметров: температуры и давления. Построение оптимальной формы зерен осуществлялось с помощью метода Вульфа. Также была исследована зависимость объемного модуля упругости поликристалла от размера составляющих его кристаллитов.

Было получено, что основными границами раздела, определяющими форму зерна данного поликристалла алмаза, являются  $(111)/(0001)$  и  $(113)/(10\bar{1}0)$ . Было предсказано, что данный поликристалл может обладать модулем упругости, превышающим модуль упругости монокристалла алмаза.

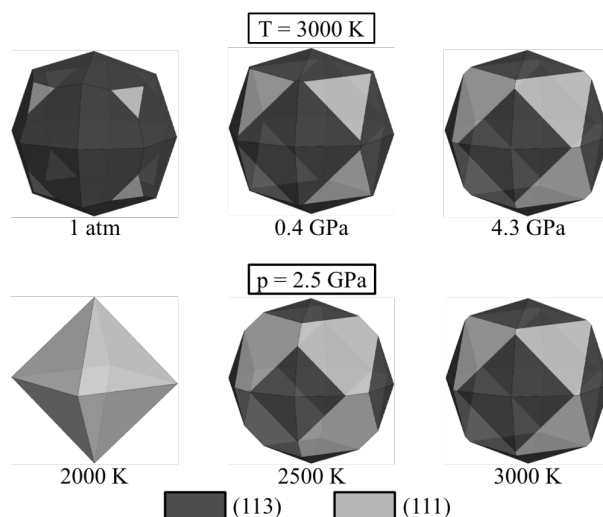


Рис.2. Влияние температуры и давления на оптимальную форму кристаллитов алмаза, соединенных через слои со структурой лонсдейлита.

### Литература

1. Hall E.O. The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results // Proc. Phys. Soc. Sect. B. 1951. Vol. 64, № 9. P. 747.
2. Tanigaki K. et al. Observation of higher stiffness in nanopolycrystal diamond than monocrystal diamond // Nat. Commun. 2013. Vol. 4. P. 2343.
3. Huang Q. et al. Nanotwinned diamond with unprecedented hardness and stability // Nature. 2014. Vol. 510, № 7504. P. 250–253.

СТРУКТУРА И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ  
(Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>)Co<sub>2</sub> И ЕГО ГИДРИДА

Трушева А.С.

МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия  
E-mail: anastasia.trusheva@yandex.ru

Соединения типа RCo<sub>2</sub> со структурой фаз Лавеса представляют интерес как с фундаментальной, так и практической точек зрения [1]. Материалы на основе RCo<sub>2</sub> могут демонстрировать многофункциональные свойства, такие как магнитострикционный и магнитокалорический эффекты, и могут использоваться в различных областях науки и техники. Нередко данные материалы эксплуатируются в водородсодержащих средах. Известно, что водород проникая в кристаллическую решетку соединений, может значительным образом менять их магнитные свойств [2]. Соединения RCo<sub>2</sub> способны поглощать до 4 атомов водорода на формульную единицу. От количества поглощенного водорода зависит изменение свойств соединений RCo<sub>2</sub>. При малых концентрациях водорода температура Кюри возрастает, а при больших концентрациях водорода, наоборот, наблюдается ее резкое падение. В работе [3] показано, что внедрение трех атомов водорода в кристаллическую решетку соединения (Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>)Co<sub>2</sub> приводит к практически полному исчезновению магнитострикционного эффекта.

Целью данной работы являлось сравнительное исследование микроструктуры и магнитокалорических свойств соединения (Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>)Co<sub>2</sub> и его гидрида с невысоким содержанием водорода (Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>)Co<sub>2</sub>H<sub>0.5</sub>.

Магнитокалорический эффект исследовался прямым методом в широком интервале температур (120 – 220 К) в полях до 12 kOe. На рис.1 показана температурная зависимость магнитокалорического эффекта соединения (Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>)Co<sub>2</sub> [4] и его гидрида. Видно, что величина МКЭ уменьшается приблизительно в восемь раз в результате гидрирования. С помощью термомагнитного анализа установлено, что в результате гидрирования тип перехода из парамагнитного в ферромагнитное состояние меняется с первого (у исходного состава) на второй (у гидрида). Именно это и является причиной значительного уменьшения МКЭ.

Для исследования микроструктуры вышеприведённых соединений был использован метод атомно-силовой микроскопии (АСМ). АСМ-снимки были получены на сканирующем зондовом микроскопе (СЗМ) SMENA-A, платформа „Solver“ компании NT-MDT (г. Зеленоград). Сканирование проводилось стандартными кремниевыми кантилверами HA\_NC ETALON с резонансными частотами F = 137-235 kHz в полуконтактном режиме при комнатной температуре.

Использование метода АСМ позволило увидеть тонкую структуру образцов, которая состояла из отдельных чешуек, размер которых составлял приблизительно 250 μm (рис. 2). Введение водорода в кристаллическую решетку (Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>)Co<sub>2</sub> вызвало охрупчивание образцов.

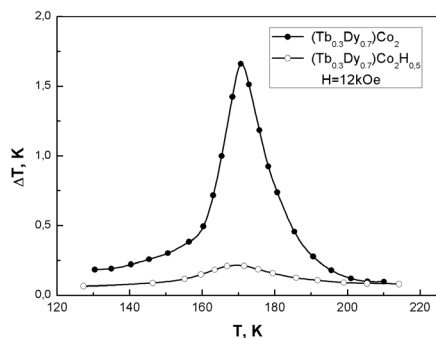


Рис.1. Температурная зависимость МКЭ соединения (Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>)Co<sub>2</sub> и его гидрида.

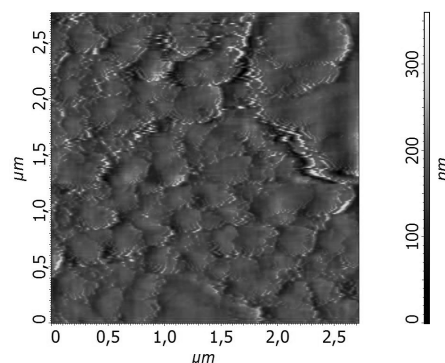


Рис.2. АСМ-снимок поверхности гидрида (Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>)Co<sub>2</sub>H<sub>0.5</sub>.

Установлено, что гидрирование образцов до невысокой концентрации водорода 0.5 ат. Н/форм. ед. приводит к увеличению температуры Кюри и увеличению магнитного момента на атомах Со. Однако, магнитокалорический эффект уменьшается значительно, в результате того, что тип фазового перехода в соединении Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>Co<sub>2</sub> меняется с первого на второй. Учет всех полученных выше результатов важен при конструировании рабочих тел магнитных рефрижераторов, а также сенсоров и датчиков различного назначения из материалов на основе соединений типа RCo<sub>2</sub>.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-13-00135). Автор выражает благодарность д.ф.-м.н. И.С. Терешинной, к.ф.-м.н. Ю.А. Овченковой и к.т.н. Т.П. Каминской за помощь в работе.

### Литература

1. N.H. Duc, T. Goto, Itinerant electron metamagnetism of Co sublattice in the lanthanide-cobalt intermetallics, in Handbook on Physics and Chemistry of Rare Earths, ed. by K. A. Gschneidner, Jr. and LeRoy Eyring, Elsevier Science, Amsterdam, 1999, vol. 26, p. 177-264.
2. G. Wiesinger and G. Hilscher, "Magnetism of hydrides," in Handbook of Magnetic Materials, K. H. J. Buschow, Ed. Amsterdam: Elsevier, 2008, vol. 17, pp. 293-456.
3. Г.А. Политова, И.С. Терешина, С.А. Никитин, Ю.Б. Патрикеев, Т.Г. Соченкова, В.Н. Вербецкий, А.А. Саламова, М.В. Макарова, Влияние гидрирования на магнитные свойства Tb<sub>0,27</sub>Dy<sub>0,73</sub>Fe<sub>2</sub> и Tb<sub>0,27</sub>Dy<sub>0,73</sub>Co<sub>2</sub> с компенсированной магнитной анизотропией, Физика твердого тела 47, 1834 (2005)
4. Г.А. Политова, И.С. Терешина, Г.С. Бурханов, О.Д. Чистяков, В.Б. Чжан, Т.П. Каминская, В.В. Попов, А. Залески, В.И. Нижанковский, Структура, магнитные, магнитоупругие и магнитотепловые свойства соединения Tb<sub>0.3</sub>Dy<sub>0.7</sub>Co<sub>2</sub>, Физика твердого тела 53, 1925 (2011).

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПРИМЕСНОЙ ФОТОПРОВОДИМОСТИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ CdHgTe

Уаман Светикова Т.А.

*МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: uaman.st15@physics.msu.ru*

Твердые растворы Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Te (кадмий-ртуть-теллур (КРТ)) являются наиболее используемым материалом современной инфракрасной оптоэлектроники [1]. Важнейшим их свойством является возможность изменения ширины запрещенной зоны  $E_g$  от нуля (при  $x \sim 0,16$ ) до 1,6 эВ (при  $x = 1$ ) при увеличении доли кадмия в растворе. Одним из факторов, ухудшающих приемные свойства таких материалов, является наличие остаточных примесей и дефектов даже в самых высококачественных структурах. Эти же примеси и дефекты могут существенно влиять на энергетический спектр полупроводника и затруднять изучение зонной структуры из-за проявлений особенностей, связанных с примесными состояниями на спектрах фотопроводимости (ФП) [2], пропускания и магнитопоглощения [3]. Поэтому изучение примесей и дефектов в КРТ является актуальной задачей.

В данной работе изучались спектры примесной фотопроводимости твердых растворов КРТ методом фурье-спектроскопии при различных температурах (4,2 К–30 К). На основании полученных данных были сделаны оценки концентрации вакансий ртути в исследуемых структурах.

Исследуемые образцы Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Te ( $0,19 < x < 0,23$ ) представляют собой эпитаксиальные плёнки, выращенные методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложке GaAs (013) в ИФП СО РАН [4]. После роста образцы обладают *n*-типом проводимости.

Отжиг структур в атмосфере гелия при  $T = 200\text{--}250\text{ }^\circ\text{C}$  в течение суток приводит к образованию дополнительных вакансий ртути и смене типа проводимости с электронного на дырочный [5]. Спектры ФП измерялись при различных температурах с помощью фурье-спектрометра Bruker Vertex 70v со спектральным разрешением  $4\text{ см}^{-1}$ . Образец размещался в проточном криостате Oxford Instruments OptistatCF, окна в котором были сделаны из полипропилена и лавсана, дополнительно применялся холодный фильтр из черного полиэтилена. В качестве источника излучения использовался глобар, в качестве светоделителя — многослойный майлар.

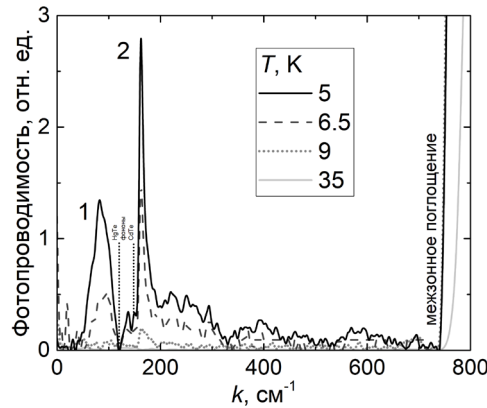


Рис. 1. Спектры фотопроводимости при различных температурах в структуре  $\text{Cd}_{0,22}\text{Hg}_{0,78}\text{Te}$ .

Во всех исследуемых образцах спектры ФП качественно были аналогичны. Спектры ФП образца  $\text{Cd}_{0,22}\text{Hg}_{0,78}\text{Te}$  представлены на рис. 1. Положение красной границы межзонного поглощения соответствует  $x = 0,22$  [6]. Увеличение температуры приводит к сдвигу красной границы в сторону больших энергий, что типично для КРТ [1].

Помимо межзонного поглощения в спектрах наблюдаются субщелевые особенности, связанные с примесным поглощением. Положение пиков хорошо согласуется с более ранними экспериментами [7]. Анализ, проведенный в [7], позволил связать пики 1 и 2 с двухзарядными акцепторными состояниями вакансии ртути: пик 1 — это переход дырки в континуум из основного состояния нейтрального ( $A^0$ ) акцептора, пик 2 — из однократно ионизированного ( $A^{-1}$ ) состояния. С ростом температуры интенсивности пиков уменьшаются вследствие изменения доли состояний акцепторов и температурного гашения. Затем особенности становятся неотличимыми на фоне шумов. В структуре  $\text{Cd}_{0,22}\text{Hg}_{0,78}\text{Te}$  для пика 1 это происходит при  $T_1 \approx 7\text{ К}$ , для пика 2 — при  $T_2 \approx 10\text{ К}$ .

Для интерпретации полученных данных и оценки концентраций вакансий ртути в исследуемых структурах был проведен расчет сигнала фототока в зависимости от температуры в рамках модели, учитывающей ионизацию двухзарядного акцептора ( $A^0$  и  $A^{-1}$  центры). Предполагалось, что релаксация дырок происходит по механизму Ясиевич, то есть вначале носители захватываются на очень мелкие акцепторные состояния ( $\hbar\omega_\Phi \ll T$ ). Тогда 
$$N_\Phi = \frac{1}{\exp(\frac{\hbar\omega_\Phi}{T}) - 1} \approx \frac{T}{\hbar\omega_\Phi}$$

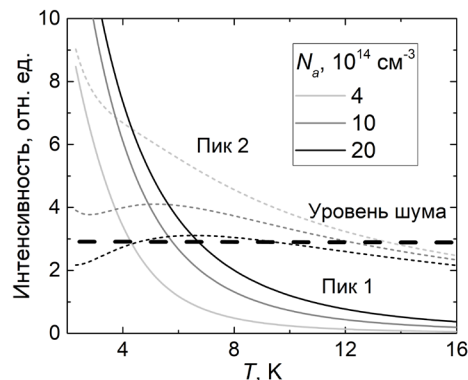


Рис. 2. Рассчитанное соотношение интенсивностей линий 1 и 2 в зависимости от температуры.

Сигнал фототока пропорционален числу центров  $N_a$  и времени жизни носителя в зоне  $\tau$ , которое обратно пропорционально числу фононов  $N_\phi$ . Расчет концентрации вакансий ртути проведен с помощью уравнения электронейтральности, в котором положительные заряды — это ионизованные доноры и дырки, а отрицательные — свободные электроны в зоне проводимости, однократно ионизованные  $A^{-1}$  центры и двукратно ионизованные  $A^{-2}$  центры. Концентрация доноров (присутствующих в структуре изначально) полагалась  $N_d = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , энергия ионизации  $A^0$  и  $A^{-1}$  центров — 11 и 21 мэВ [7].

Рассчитанные интенсивности линий, соответствующих  $A^0$  и  $A^{-1}$  центрам, при различных температурах показаны на рис. 2. Видно, что при заданном уровне шума увеличение числа акцепторов должно приводить к сближению температур исчезновения пиков 1 и 2. Для образца  $\text{Cd}_{0,22}\text{Hg}_{0,78}\text{Te}$  концентрацию акцепторов можно оценить как  $N_a = 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . В других исследованных структурах пик 1 исчезал при меньших температурах, а пик 2 при больших, что указывает на меньшее число вакансий ртути в них.

Автор благодарна своим научным руководителям А. В. Галеевой и А. В. Иконникову за постановку задачи и помощь в проведении экспериментов, Д. В. Козлову за выполненные расчеты.

### Литература

1. A. Rogalski // Opto-Electron. Rev. 20 279 (2012).
2. V. V. Romyantsev et. al // Semicond. Sci. Tech. **28**, 125007 (2013).
3. F. Teppe et. al // Nat. comm. **7**, 12576 (2016).
4. V. S. Varnavin et. al // Proc. SPIE 5136, Solid State Crystals 2002: Crystalline Materials for Optoelectronics (2003)
5. В. С. Варавин, Г. Ю. Сидоров Ю. Г. Сидоров // ЖФХ **84**, 1605 (2010).
6. J. P. Laurenti, J. Camassel, A. Bouhemadou et al. // J. Appl. Phys., **67**, 6454 (1990).
7. V. V. Romyantsev et al. // Semicond. Sci. Technol. **32** 095007 (2017).

## МОНОСЛОЙНЫЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ НА ОСНОВЕ ТИОФЕН-ФЕНИЛЕНОВЫХ СООЛИГОМЕРОВ

Федоренко Р.С.

*МГУ имени М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: roman96233@yandex.ru*

В последние годы успешно развивается новая отрасль науки и технологий — органическая электроника. Использование органических соединений удешевляет и упрощает технологический процесс производства электронных устройств за счёт возможности реализации растворных, печатных, аддитивных методов. Недавний прогресс в области органической электроники основан на использовании ультратонких кристаллов в качестве активного слоя в органических полевых транзисторах. Данные материалы комбинируют в себе высокую люминесценцию с эффективным амбиполярным транспортом зарядов. Благодаря использованию ультратонких кристаллов устройства органической электроники могут быть гибкими, прозрачными, легкими, что делает эту область перспективной в сфере здравоохранения, информационной безопасности и Интернета.

В этой работе использовался тиофен-фениленовый сополимер с сопряженным ядром ТТРГТ (Р — фенилен, Т — тиофен) и шестью алкильными заместителями. На кремниевой подложке были выращены ультратонкие пленки из раствора ортодихлорбензола с концентрацией 0,12-0,35 г/л методом центрифугирования. Предполагается, что рост кристаллов происходит на поверхности растворителя, следовательно кристаллы не соприкасаются с подложкой, поэтому рост не зависит от качества поверхности подложки [1]. Латеральные размеры пленок достигали 1мм, причем вся поверхность пленки была оптически однородной, при этом пленки имеют кристаллическую структуру [2]. С по-



мощью методов микропечати жидкофазным методом наносились электроды из PEDOT:PSS, которые в дальнейшем использовались в качестве стока и истока в органическом полевом транзисторе. В итоге с помощью жидкофазного метода был получен органический ОПТ, с верхними электродами, в котором в качестве активного слоя выступал олигомер ДН-ТТРПТ, верхние электроды состояли из PEDOT:PSS, а в качестве затвора использовалась кремниевая подложка покрытая слоем диоксида кремния толщиной в 200нм.

В данной работе были получены транзисторы на основе кристаллов ДН-ТТРПТ с подвижностью  $\mu=0,14\text{см}^2/\text{Вс}$ . Пороговое напряжение составило 20 В (рис. 1).

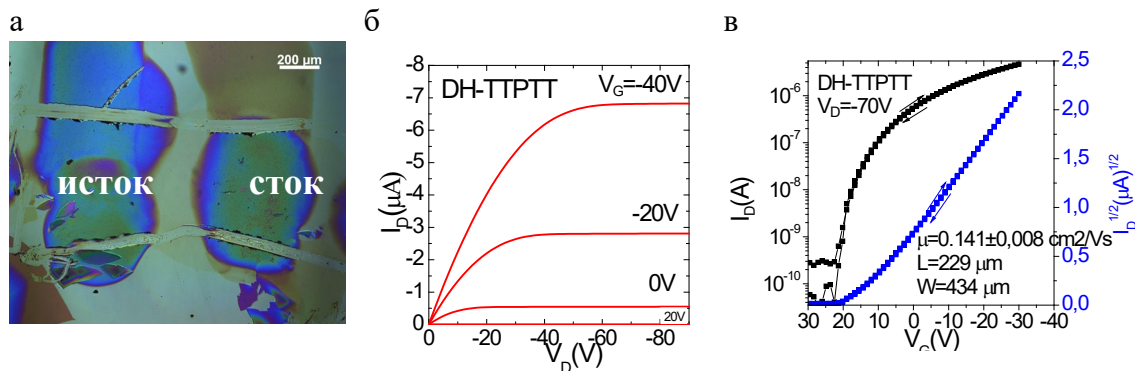


Рис.1. а – фотографии кристалла ДН-ТТРПТ в оптическом микроскопе, б – выходные характеристики этого устройства, в – передаточные характеристики в насыщенном режиме.

В результате выполнения были получены монослойные кристаллы с латеральными размерами 1мм, при этом транзисторы на их основе демонстрировали подвижность в  $0,14\text{см}^2/\text{Вс}$ . В комбинации с простотой изготовления и возможной гибкостью кристаллов эти устройства могут иметь хорошее практическое применение.

### Литература

1. AnastasiaV. Glushkova, ElenaYu. Poimanova, Vladimir V. Bruevich Ultrathin solution-processed single crystals of thiophene-phenylene cooligomers, Organic Field-Effect Transistors XVI, 25 August 2017
2. Vladimir V. Bruevich, AnastasiaV. Glushkova, ElenaYu. Poimanova Large-Size Single-Crystal Oligothiophene-Based Monolayers for field-Effect Transistors, ACS Appl. Mater. Interfaces 11 (6), pp 6315–6324, 21 January, 2019

## СТРУКТУРНАЯ И МАГНИТНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ ТИПА «ЯДРО-ОБОЛОЧКА» $\text{Fe}_x\text{O}_y@\text{C}$ , ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ОДНОСТАДИЙНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО ПИРОЛИЗА

Фунтов К.О., Старчиков С.С., Баскаков А.О.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

E-mail: funtov.ko@gmail.com

Уже более десятилетия магнитные наночастицы привлекают большой интерес исследователей благодаря возможности их применения в различных областях науки и техники, в особенности, в биомедицине и биотехнологиях [1].

Однако, чистые магнитные наночастицы склонны к окислению под воздействием окружающей среды, что приводит к ухудшению их свойств и налагает ограничения на область их применения [2]. Поэтому были предложены различные способы защиты наночастиц, в частности, покрытие органическими и неорганическими материалами, такими как углерод, поскольку углерод является недорогим и биосовместимым материалом [3].

Наноструктуры магнетита  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  с углеродной оболочкой также все более активно применяются в различных областях техники [4]. Зачастую, в качестве ядра нужно использовать чистую фазу магнетита, в то время как наличие примеси антиферромагнитных оксидов, таких как вюстит или гематит, уменьшает возможности использования наночастиц оксидов железа. Поскольку фазовая чистота является прямым результатом синтеза наночастиц, остается еще одна важная задача - понять, как условия синтеза влияют на образование наночастиц. Обычно процесс получения материалов типа «ядро-оболочка» протекает в два этапа: сначала синтезируется материал ядра, очищается, а затем, на второй стадии, ядро покрывается материалом оболочки уже другим способом.

В данной работе представлены результаты получения наночастиц магнетита, покрытых оболочкой углерода, методом одностадийного термического пиролиза. Серия наночастиц с температурами синтеза от 350 до 400 °С была исследована с помощью комплекса методов, включая просвечивающую электронную микроскопию, порошковую рентгеновскую дифракцию, рамановскую и мессбауэровскую спектроскопию, а также магнитные измерения.

Установлено, что полученные наноконпозиты представляют собой сферические и почти монодисперсные наночастицы оксидов железа со средним диаметром 40-50 нм, покрытые оболочкой аморфного углерода с толщиной около 5-10 нм. При температурах обработки  $T_R = 340-350^\circ\text{C}$  сначала образуются ядра магнетита  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , затем при нагревании выше  $360^\circ\text{C}$  начинает появляться углеродная оболочка. Когда  $T_R$  поднимается до  $380^\circ\text{C}$ , создается чистая фаза магнетита в ядре наноконпозитов. Дальнейшее увеличение  $T_R$  приводит к появлению фазы вюстита  $\text{Fe}_{1-x}\text{O}$  (вместе с магнетитом), чья доля увеличивается примерно от 9% до 39% в образцах, полученных при 390 и 400 °С, соответственно.

Показано, что фаза вюстита генерируется и образуется на поверхности частиц магнетита под воздействием углерода. Таким образом, мы можем контролировать динамику восстановления оксида железа от  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  до  $\text{FeO}$  под воздействием углерода с увеличением температуры синтеза. Была построена диаграмма, демонстрирующая процесс термического восстановления магнетита до вюстита под воздействием углерода с образованием наноконпозитов  $\text{Fe}_x\text{O}_y@\text{C}$ .

Важным выводом является то, что превращение магнетита в вюстит происходит внутри ядра частицы, а не путем появления отдельных частиц магнетита и вюстита.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» в части исследований рамановской спектроскопии и электронной микроскопии а также Российского научного фонда (грант № 14-12-00848 П) в части исследований мессбауэровской спектроскопии и порошковой рентгеновской дифракции.

Автор выражает благодарность проф. д.ф.-м.н. Любутину Игорю Савельевичу за научное руководство.

### Литература

1. M. Mahmoudi, H. Hosseinkhani, M. Hosseinkhani, S. Boutry, A. Simchi, W. Shane Journeay, K. Subramani and S. Laurent, Magnetic resonance imaging tracking of stem cells in vivo using iron oxide nanoparticles as a tool for the advancement of clinical regenerative medicine, *Chem. Rev.*, 2011, **111**, 253–280
2. M. R. Ghazanfari, M. Kashefi, S. F. Shams, M. R. Jaafari, M. R. Ghazanfari, M. Kashefi, S. F. Shams and M. R. Jaafari, Perspective of  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  Nanoparticles Role in Biomedical Applications, *Biochem. Res. Int.*, 2016, **2016**, 1–32.
3. A. H. Lu, E. L. Salabas and F. Schüth, Magnetic nanoparticles: Synthesis, protection, functionalization, and application, *Angew. Chemie - Int. Ed.*, 2007, **46**, 1222–1244.
4. T. Wu, Y. Liu, X. Zeng, T. Cui, Y. Zhao, Y. Li and G. Tong, Facile Hydrothermal Synthesis of  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}$  Core-Shell Nanorings for Efficient Low-Frequency Microwave Absorption, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2016, **8**, 7370–7380.

## КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ РАСПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

Хазбулатов З.Л.

*Чеченский государственный университет, Грозный, Россия*

*E-mail: zelim\_han9795@mail.ru*

В работе проведены расчеты по методам прогноза и теоретическим уравнениям изотерм поверхностного натяжения, которых в частности учитывается зависимость молярной поверхности от состава. Обычно при выводе различных феноменологических уравнений основываются на свойствах чистых компонентов. В литературе имеются лишь полуэмпирические выражения подобного типа, устанавливающие связь объемных свойств, таких как термодинамические функции смещения, коэффициенты активностей, а также для прогноза диаграмм состояния многокомпонентных систем. В научной литературе очень мало работ, посвященных данной проблеме, хотя такие исследования имеют на наш взгляд большое значение.

Поэтому проблема получения новых методов прогноза и расчета поверхностных свойств многокомпонентных систем остается актуальной.

В монографии Р.Х. Дадашева [1] с учетом зависимости молярной площади от состава получено следующее выражение для расчета концентрационной зависимости поверхностного натяжения.

$$\sigma = \sigma_{13} \left[ \frac{\gamma^*}{\gamma^* + (\gamma_2 m - \gamma^* + mRT \ln m)x_2} \right]^{\frac{(m-1)RT}{\gamma_2 m - \gamma^* + mRT \ln m}}, \quad (1)$$

где,  $m$  — параметр не зависящий от состава расплава,

$$\gamma^* = \frac{\gamma_1 k^\omega + \gamma_3 + k^\omega RT \ln \frac{k^\omega}{k}}{k^\omega + 1} + RT \ln \frac{k+1}{k^\omega + 1}, \quad \sigma_{13} — \text{поверхностное натяжение двойной системы 1-3.}$$

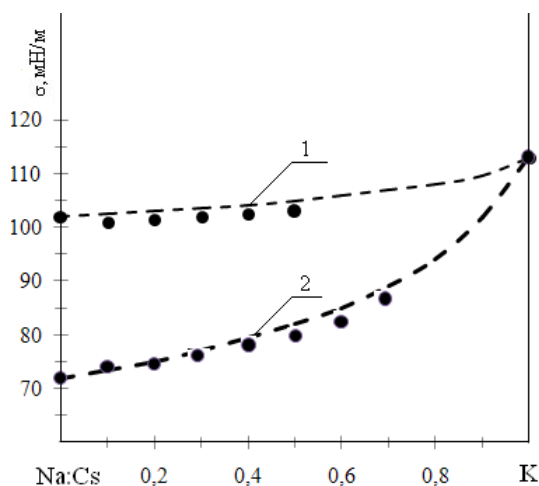


Рис. 1. Изотермы поверхностного натяжения системы Na-Cs-K при  $T=373$  К, для разреза:  
1 — Na:Cs=6:1; 2 — Na:Cs=1:6. Точки — экспериментальные данные [2],  
штрихованная линия — расчетные данные.

Это выражение отличается от известных уравнений тем, что в эти уравнения входят значения поверхностного натяжения не только чистых компонентов, но и боковых двойных систем. Благодаря этому данное уравнение более точно описывает концентрационную зависимость поверхностного натяжения многокомпонентных растворов. При этом наличие в литературе достоверных данных по поверхностному натяжению боль-

шинства двойных систем делает возможным широкое использование подобных уравнений для практических расчетов.

По уравнению (1) проведены расчеты поверхностного натяжения боковых двойных систем цезий-калий, цезий рубидий и расплавов тройной системы натрий-цезий-калий.

Проведенные расчеты показали, что для двойных и тройных расплавов щелочных металлов уравнение (1) в пределах погрешности эксперимента описывает экспериментальные кривые.

Таким образом, в работе рассмотрены термодинамические уравнения изотерм поверхностного натяжения тройных расплавов. Расчеты показывают, что уравнение изотерм поверхностного натяжения при учете концентрационной зависимости молярной поверхности с достаточной точностью описывают изотермы поверхностного натяжения двойных и тройных расплавов на основе щелочных металлов. Показано, что изотермы поверхностного натяжения многокомпонентных расплавов можно рассчитать по изотермам двойных систем составляющих многокомпонентную систему.

### Литература

1. R. Dadashev Thermodynamics of surface phenomena. Cambridge international science publishing, 2008. –281 p.
2. Архестов Р.Х., Алчагиров Б.Б., Хоконов Х.Б. Плотность и поверхностное натяжение расплавов системы натрий-цезий-калий. /В сб. Физика и химия перспективных материалов. Нальчик: КБГУ. 1998. С. 10-14.

## СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЖЕЛЕЗО-НИКЕЛЕВЫХ И МЕДНО-КОБАЛЬТОВЫХ НАНОПРОВОЛОК

Хечумян С.А.

*МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*  
*E-mail: olympic44@yandex.ru*

Среди множества различных способов приготовления наноматериалов наибольший интерес представляет метод матричного синтеза. [1,2,3] На первом этапе изготавливается шаблон с множеством сквозных цилиндрических форм. На следующем этапе поры заполняются необходимым веществом. Существует огромное количество методов, позволяющих реализовать данный процесс. В качестве матрицы в данной работе используется полимерная трековая мембрана, которая заполняется металлом с помощью метода гальванического осаждения, основанном на явлении электролиза. [4]. Трековые мембраны – тонкие пористые полимерные слои или плёнки с системой пор, образованные путём облучения на ускорителе тяжёлыми ионами непористых полимерных материалов и последующего их травления для формирования в местах скрытых областей повреждений, так называемых латентных треков, которые затем превращают в сквозные поры. Важнейшим преимуществом технологии трековых мембран является прецизионность задания размера пор и, следовательно, возможность создания одинаковых наноразмерных объектов. Опубликовано большое количество работ по синтезу нанопроволок из магнитных материалов различного состава. [5,6]

В настоящей работе методом матричного синтеза получены нанопроволоки из сплава железо-никель и сплава медь-кобальт. Синтез выполнялся в гальванической ячейке с использованием электролитов, содержащих соответствующие ионы металлов.

После синтеза проводилось рентгеноструктурное исследование образцов. Примеры полученных для образцов железо-никель рентгенограмм приведены на Рис.1

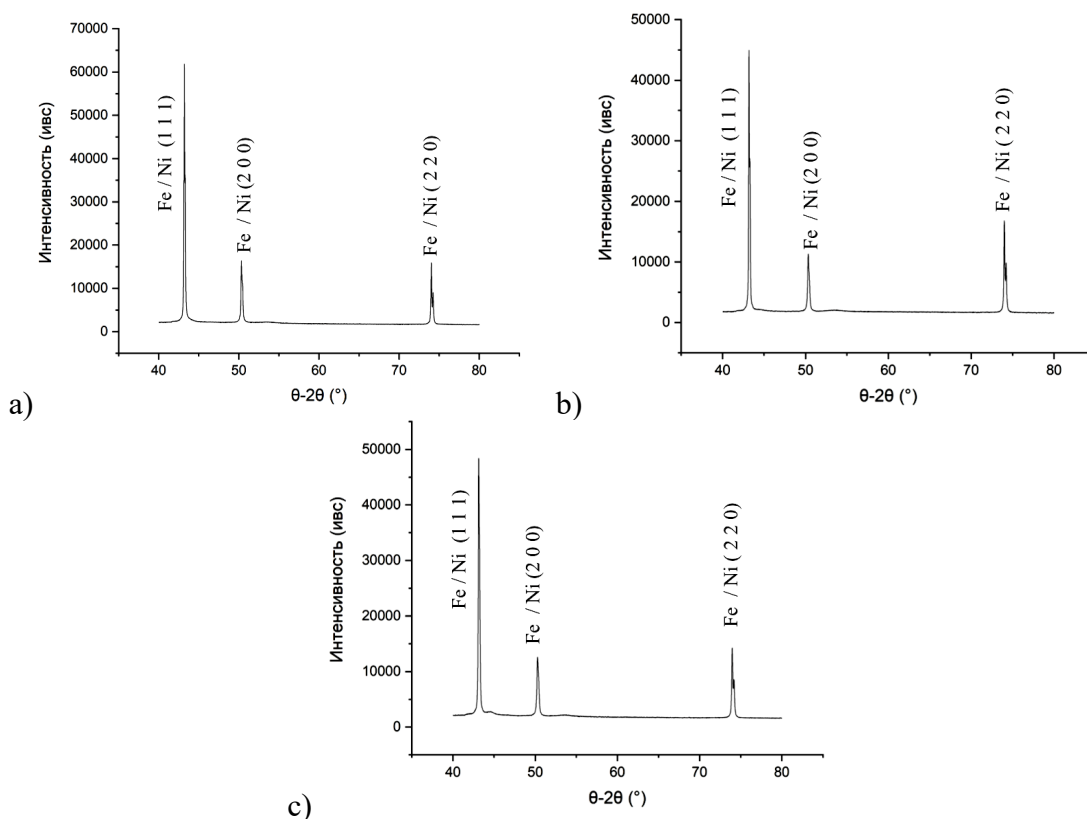


Рис.1 Рентгенограммы железо-никелевых нанопроволок с различными концентрациями и диаметрами пор а) Fe25%Ni75%, 0.03мкм; б) Fe50%Ni50%, 0.07мкм; в) Fe75%Ni25%, 0.2мкм.

По экспериментально определенному значению межплоскостного расстояния с помощью уравнения Вульфа-Брэгга, связывающие межплоскостное расстояние с углом дифракции можно определить постоянную кристаллической решетки для образцов кубической системы:  $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

Целью анализа железо-никелевых образцов являлось сравнение величины постоянной решетки в зависимости от изменения параметров роста нанопроволок: концентрации железа/никеля (от 25 до 75%) и диаметра пор.

Полученные результаты приведены в Таблице

Fe25%Ni75%, 0.03мкм	3.6242 Å	Fe50%Ni50%, 0.07мкм	3.6282 Å
Fe25%Ni75%, 0.07мкм	3.6275 Å	Fe50%Ni50%, 0.2мкм	3.6285 Å
Fe25%Ni75%, 0.2мкм	3.6276 Å	Fe75%Ni25%, 0.07мкм	3.6309 Å
Fe50%Ni50%, 0.03мкм	3.6280 Å	Fe75%Ni25%, 0.2мкм	3.6310 Å

Из Таблицы видно увеличение постоянной решетки как при повышении концентрации железа в исследуемых образцах (от 25 до 75%), так и при увеличении диаметра пор (от 0.03 до 0.2 мкм)

На следующем этапе работы были рассмотрены нанопроволоки из меди-кобальта. При росте изменялись следующие параметры: время роста (от 2,5 до 25 минут) и ростового потенциала (от 0.2 до 1.5 В)

(0.2V;20min)	3.6323 Å	(1V; 10min)	3.6276 Å
(0.5V;15min)	3.6303 Å	(1.5V;2.5 min)	3.5680 Å

При потенциале роста 1.5 В происходит резкое уменьшение параметра решётки, что свидетельствует о заметном преобладании кобальта в сплаве. Этот вывод соответствует данным элементного состава, полученным на СЭМ.

U, В	Co %	Cu %
0.2	0.5	99.5
0.5	0	100
1	30.16	69.84
1.5	80.87	19.13

### Литература

1. Martin C.R. // Science. 1961. P.266.
2. Анищик В. М.// Наноматериалы и нанотехнологии. Минск: изд. БГУ. 2008.372 с.
3. Давыдов А. Д., Волгин В.М.// Электрохимия. 2016. Т.52. № 9. С. 905.
4. Глинка Н.Л. Общая химия под ред. В.А. Рабиновича, Л., Химия, 1988, 703 с.
5. Va'zquez M. // Magnetic Nano- and Microwires: Design, Synthesis. 2005. P.395
6. Ohgai T.// Electrodeposited Nanowires and Their Applications Ed. N. Lupu 2010. P.61.

## РАСSEЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПРЯМОУГОЛЬНОМ ПОТЕНЦИАЛЬНОМ БАРЬЕРЕ В НОДАЛЬНОМ ПОЛУМЕТАЛЛЕ

Хохлов Д.А.

*Московский Физико-Технический Институт, Москва, Россия*

В данной работе были вычислены коэффициенты прохождения и отражения для электронов, рассеивающихся на прямоугольном потенциальном барьере в нодальном полуметалле. Гамильтониан, описывающий электроны, дается формулой [1]:

$$\hat{H} = (m - B\hat{k}_\perp^2)\sigma_x + \hat{k}_z\sigma_z + U(\mathbf{r})\sigma_0, \quad (1)$$

где  $\sigma_\alpha$  – матрицы Паули,  $m$  – аналог массы покоя,  $U(\mathbf{r})$  – потенциал,  $B$  – некоторый положительный коэффициент, а  $\hat{k}_\beta$  – оператор импульса по соответствующей оси. Ось  $z$  является осью анизотропии, так что необходимо отдельно рассматривать барьеры по  $Oz$  и по  $Oy$ . Спектр рассматриваемых частиц имеет следующий вид:

$$\epsilon_{e,h} = U \pm \sqrt{(m - Bk_\perp^2)^2 + k_z^2}, \quad (2)$$

здесь индексы  $e, h$  означают электронную и дырочную ветви спектра и соответствуют знакам '+' и '-' перед корнем. Для каждого направления были рассмотрены конечный и бесконечный барьеры. Во всех случаях мы находили волновую функцию до барьера, под барьером и после барьера (в случае бесконечно длинного барьера – только в двух областях). Затем осуществлялась сшивка волновой функции на границе областей по непрерывности и непрерывности производной (для барьера по  $Oz$  только по непрерывности). Решая систему линейных уравнений, мы получили амплитуды прошедшей и отраженной волн.

В случае барьера по  $Oz$  имеем потенциал  $U(z) = U(\theta(z) - \theta(z-L))$ , где  $\theta(z)$  – функция Хевисайда. Для данной геометрии был обнаружен парадокс Клейна [2]. Он возникает при условии  $m - Bk_\perp^2 = 0$ . Легко заметить, что при этом гамильтониан описывает одномерные безмассовые фермионы, для которых наблюдается Клейновское туннелирование.

Выпишем формулу для амплитуды отраженной волны

$$r = \sqrt{\frac{Q_{\perp}^2 + (\epsilon + k_z)^2}{Q_{\perp}^2 + (\epsilon - k_z)^2}} (1 - e^{2iq_z L}) \times \frac{(U - k_z)^2 - q_z^2}{[(k_z + q_z)^2 - U^2] - [(k_z - q_z)^2 - U^2] e^{2iq_z L}}, \quad (3)$$

где  $Q_{\perp} = m - Bk_{\perp}^2$ ,  $q_z$  –  $z$ -компонента волнового вектора под барьером, а  $L$  – длина барьера. В противоположность свободному, не релятивистскому электрону, обнаружены размерные эффекты даже при  $\epsilon < U$ . Для барьера бесконечной длины так же обнаружен парадокс Клейна.

В случае барьера по  $Oy$  геометрия такая:  $U(y) = U(\theta(y) - \theta(y - L))$  важным является, что при фиксированных  $\epsilon$  и  $k_z$  возможны 2 различных значения

$$|k_{\perp}| = \sqrt{\frac{1}{B} \left( m \pm \sqrt{\epsilon^2 - k_z^2} \right)}. \quad (4)$$

Это означает, что, упруго рассеиваясь на барьере, частица может изменить модуль волнового вектора. Данный случай решался численно для различных значений параметров.

Было обнаружено полное отражение с изменением модуля волнового вектора при  $\epsilon = k_z$ . При увеличении длины барьера наблюдаются размерные эффекты и в случае  $\epsilon < U$ . Как и в случае барьера по  $Oz$  это происходит, потому что, выражая волновой вектор под барьером из формулы (2), мы можем получить вещественное значение и для малых энергий. Соответственно, затухания не произойдет.

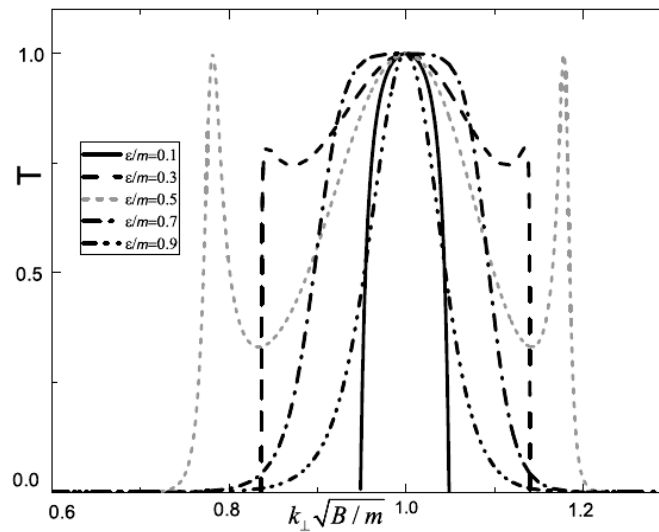


Рис. 3. Зависимость коэффициента прохождения от  $k_{\perp}$ . Максимумы на графике при  $k_{\perp} = 1$  соответствует Клейновскому туннелированию. Единичная вероятность туннелирования при других  $k_{\perp}$  и  $\epsilon = 0.5$  обусловлены размерными эффектами. Параметры следующие:  $m = B = U = 1; L = 5$ .

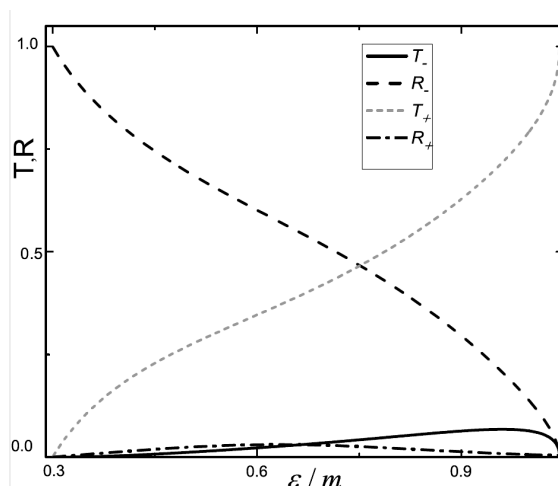


Рис.2. На этом рисунке изображены коэффициенты прохождения и отражения  $T$  и  $R$ . Знаки '+' и '-' в индексах означают больший и меньший  $|k_{\perp}|$  соответственно. Модуль волнового вектора в падающей волне считался большим из двух возможных. Графики строились при следующих значениях параметров:  $m = B = U = 1; k_z = 0.3; L = 5$ .

### Литература

1. Yan, Zhongbo, Peng-Wei Huang, Zhong Wang Collective modes in nodal line semimetals // *Physical Review B* 93.8 (2016): 085138.
2. Katsnelson, M. I., Novoselov K. S., Geim A. K. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene // *Nature Physics* 2.9 (2006): 620.

## ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ МЕТАЛЛА В ПОРЫ ТРЕКОВОЙ МЕМБРАНЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ И СТРУКТУРА ПОЛУЧАЕМЫХ НАНОПРОВОЛОК

Черкасов Д.А.

МИЭМ НИУ ВШЭ, Москва, Россия

E-mail: dim\_cherckasov@mail.ru

Целью настоящей работы было изучение влияния магнитного поля на рост наноструктур - на примере массива гомогенных нанопроволок из Co и сплава NiFe, а также гетероструктурных нанопроволок Cu/Ni, полученных методом матричного синтеза. Применялось магнитное поле различного направления и напряженности, затем проводилось исследование различий в их структуре полученных НП с помощью растровой электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа, а также магнитометрии и магнитосиловой микроскопии.

Известно, что трековые мембраны могут использоваться как для целей фильтрации, так и для матричного синтеза. Суть последнего состоит в возможности заполнения пор матрицы требуемым веществом. Метод матричного синтеза, с использованием трековых мембран, позволяет получать массивы тонких стержней (нанопроволок). Одним из основных плюсов применения матричного синтеза является огромный спектр регулируемых параметров как матрицы, так и процесса. Тем самым, можно выбирать оптимальные параметры для получения НП с нужными свойствами. Одним из факторов, который влияет на электроосаждение магнитных нанопроволок может быть внешнее магнитное поле. Вопрос о том, как поле может влиять на рост магнитного металла в наноразмерных порах практически не изучен.

В работе применялись трековые мембраны с диаметром пор 100 нм и плотностью пор около  $10^9$  см<sup>2</sup>. На одну из поверхностей мембраны для создания проводимости был нанесен сплошной токопроводящий слой меди. Для осаждения гомогенных нанопрово-



лок из кобальта применялся электролит следующего состава:  $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  320 г/л  $\text{H}_3\text{BO}_3$  – 40 г/л; для сплава NiFe:  $\text{H}_3\text{BO}_3$  – 15 г/л;  $\text{NiCl} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  – 40 г/л;  $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  – 16 г/л;  $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  – 16 г/л; стабилизирующие добавки. Данный состав обеспечивал осаждение сплава никеля и железа в равных долях. Для осаждения гетероструктурных нанопроволок (чередующиеся слои Cu и Ni) применялся электролит следующего состава:  $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  - 196,7 г/л;  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  - 6,25 г/л;  $\text{H}_3\text{BO}_3$  - 31,6 г/л. Осаждение велось в самодельной гальванической ячейке, в качестве источника использовался потенциостат Ellins, позволявший работать как в режиме постоянного напряжения, так и в режиме «импульсного напряжения». Электроосаждение металла проводилось в потенциостатическом режиме при напряжениях: 0,8 В – для Co, 1,5 – для сплава FeNi и 0,7/1,8 В для слоев Cu/Ni соответственно в гетероструктурных НП. Подробно режимы описаны в работе [1].

Осаждение проводилось в специально сконструированной гальванической ванне, конструкция которой позволяла прикладывать постоянный магнит (в данной работе – неодимовые, с индукцией от 0,15 до 0,3 Тл) вплотную к выращиваемому образцу. Таким образом, напряжённость магнитного поля в зоне роста была максимальна, и коллинеарна выращиваемым проволокам. Зона роста была искусственно уменьшена до поперечных размеров меньших, чем диаметр магнита. Таким образом, беря во внимание факт непосредственной близости магнита и образца (расстояние от магнита до зоны роста много меньше диаметра магнита) предполагается, что НП растут в однородном магнитном поле. Во время роста велась запись ампер-временной зависимости.

Зависимость тока от времени показала, что время роста гомогенных нанопроволок зависит от наличия и направления магнитного поля. В частности, в эксперименте время роста гомогенных нанопроволок из FeNi (до полного заполнения пор) без магнитного поля составляло порядка 480 секунд, тогда как при приложении магнита – 410 сек. (в работе [2] было показано, что момент полного заполнения пор соответствует резкому увеличению силы тока). Ампер-временная зависимость для осаждения гетероструктурных нанопроволок (Ni/Cu) показала аналогичную тенденцию.

После электроосаждения массивов нанопроволок матрицы удалялись, а образцы исследовались с помощью высокоразрешающего растрового электронного микроскопа. Микроскопия показала, что топография гомогенных НП (NiFe) при приложении магнитного поля меняется незначительно. В гетероструктурных НП (Ni/Cu) выращенных при приложении магнита южным полюсом в слоях Ni (осаждение при большем потенциале) образовались полости. Также, микроскопия подтверждает результат ампер-временной зависимости для гетероструктурных нанопроволок – средняя длина НП, выращенных в магнитном поле увеличилась в сравнении с НП, выращенными без него.

Также образцы исследовались методом рентгеноструктурного анализа. Было показано, что имеется корреляция относительной интенсивности и положения рефлексов в зависимости от величины прикладываемого во время роста магнитного поля. В частности, рефлексы образцов НП из Co, выращенных в магнитных полях 0,15 Тл и 0,3 Тл – отличаются незначительно. В связи с этим были проведены дополнительные исследования при полях, меньших чем 0,15 Тл, которые показали плавный переход в относительной интенсивности рентгеновских рефлексов – от отсутствия НП к 0,15 Тл.

Также в работе приводятся и обсуждаются магнитометрия и МСМ-изображения гомогенных НП (Co и FeNi).

Работа была выполнена на базе Института Кристаллографии РАН, лаборатория ядерных фильтров, руководитель – Д.Л. Загорский.

Работы проводилось в рамках госзадания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН - при поддержке ФАНО (соглашение № 007- ГЗ/ЧЗ363/26), синтез НП-поддержан грантом РФФИ 18-32-01066. Авторы благодарны проф. П.Ю. Апелю (ОИЯИ, г. Дубна) за образцы мембран.

**Литература**

1. Долуденко И. М., Бондаренко Г. Г., Загорский Д. Л., Бедин С.А.//Применение трековых матриц для получения гетероструктурных нанопроволок Ni/Cu (стр. 64)// Труды 17 Международной конференции "Радиационная физика твердого тела" (Севастополь, 10-15 июля 2017 г.): ФГБНУ "НИИ ПМТ", 2017 г., 522с.
2. Загорский Д. Л., Фролов К. В., Бедин С. А., Чуев М. А., Ломов А. А., Долуденко И. М.// Матричный синтез в порах трековых мембран: особенности получения и исследование металлических нанопроволок (стр. 196)// Труды 17 Международной конференции "Радиационная физика твердого тела" (Севастополь, 10-15 июля 2017 г.): ФГБНУ "НИИ ПМТ", 2017 г., 522с

**ИССЛЕДОВАНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА ГЕКСАФЕРРИТОВ М-ТИПА  $Ba_{1-x}Pb_xFe_{12}O_{19}$  В ТЕРАГЕРЦОВОМ-ИНФРАКРАСНОМ ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ**

Чечёткин А.В.

*МФТИ ГУ, Долгопрудный, Россия  
E-mail: chechyotkin.av@phystech.edu*

Общая химическая формула гексаферрита М-типа:  $AM_{12}O_{19}$ , где в роли крупного катиона А выступают ионы Ba, Pb, Sr, а более мелкие катионы М наиболее часто представлены ионами Fe. Гексаферриты М-типа, благодаря своим магнитным свойствам (высокая намагниченность насыщения, большая коэрцитивная сила и т.д.), крайне востребованы в областях электроники, связанных с генерацией, детектированием и фильтрацией сигналов, широко представлены в устройствах телекоммуникаций. Подстройка диэлектрических параметров в данных соединениях осуществима благодаря достаточно сложному строению кристаллической решетки гексаферритов, в которой крупный катион (Ba, Pb и т.д.) имеет двенадцатикординатное окружение, а ионы  $Fe^{3+}$  распределяются по пяти различным кристаллографическим позициям, три из которых октаэдрические, одна тетраэдрическая и одна представляет собой тригональную бипирамиду. Частичная замена ионов бария на более тяжелые ионы свинца приводит к разупорядочению структуры, изменению локальной симметрии сайт-позиций катионов, и, как следствие, влияет на диэлектрические характеристики соединения (комплексную диэлектрическую проницаемость, комплексный показатель преломления, тангенс угла потерь и т.д.) [1].

В данной работе методами терагерцовой и инфракрасной спектроскопии изучены спектры комплексной диэлектрической проницаемости монокристаллов гексаферрита бария-свинца  $Ba_{0.4}Pb_{0.6}Fe_{12}O_{19}$ ,  $Ba_{0.2}Pb_{0.8}Fe_{12}O_{19}$  и  $Ba_{0.9}Pb_{0.1}Fe_{12}O_{19}$  в области частот  $10-8000\text{ см}^{-1}$  в диапазоне температур  $10-300\text{ К}$  при поляризации вектора зондирующего излучения  $E$  перпендикулярно кристаллографической оси  $c$ . В области  $10-100\text{ см}^{-1}$  с применением терагерцового импульсного спектрометра были получены спектры пропускания, а в диапазоне частот от  $50$  до  $8000\text{ см}^{-1}$  при помощи инфракрасного вакуумного Фурье-спектрометра были получены спектры отражения. Далее было проведено моделирование наблюдаемых особенностей методом наименьших квадратов с использованием модели независимых Лорентцианов, что позволило определить параметры (диэлектрический вклад, резонансная частота, сила осциллятора) зарегистрированных резонансных линий поглощения.

Природа наблюдаемых в области частот  $90-1000\text{ см}^{-1}$  резонансных линий поглощения, связана с решеточными возбуждениями. Также исследована низкоэнергетическая динамика резонансов в области  $10-90\text{ см}^{-1}$  (рис.1), природа которых отлична от фоновых колебаний и является проявлением электронных переходов в тонкой структуре основного состояния  $Fe^{2+}$ , расщепленного под действием спин-орбитального взаимодействия второго порядка.

### Литература

1. Obradors, X., Collomb, A., Pernet, M., Samaras, D., & Joubert, J. C. (1985). X-ray analysis of the structural and dynamic properties of BaFe 12 O 19 hexagonal ferrite at room temperature. *Journal of Solid State Chemistry*, 56(2), 171-181.

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МОНОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Шагинян А.Л., Прядченко В.В., Раздоров В.Н., Авакян Л.А.

*ЮФУ, физический факультет, Ростов-на-Дону, Россия*

*E-mail: anaidashaginyan@yandex.ru*

В последние десятилетия уникальные свойства металлических наночастиц, такие как их высокая каталитическая активность [1], антисептические и терапевтические свойства [2], оптические свойства [3, 4], а также иные применения в биологии и медицине [5, 6], привлекают внимание исследователей всего мира. На сегодняшний день существует множество экспериментальных методов диагностики структурных характеристик таких материалов, основанных на взаимодействии различных видов излучения с веществом. Полноценный структурный анализ, как правило, включает в себя применение нескольких методов экспериментальной диагностики с последующей расшифровкой данных, основанной на имеющихся теоретических представлениях о процессах взаимодействия зондирующего излучения с веществом. Такой подход, как правило, представляет собой оптимизационную задачу, в рамках которой наборы экспериментальных данных подгоняются теоретическими функциями, рассчитываемыми из первых принципов.

Альтернативой данному подходу является подход, основанный на построении систем *машинного обучения* [7]. Принципиальным отличием подобных систем от классических является то, что в систему не закладываются явно знания о методиках расшифровки данных, однако она способна обучаться извлекать одни данные из других. В настоящей работе мы проводим анализ методом «обучения с учителем» с использованием многослойной и сверточной нейронных сетей для определения структурных характеристик небольших ( $D < 40$  нм) металлических наночастиц на основании XANES спектров [8]. К таким структурным характеристикам в первую очередь относятся координационные числа первых четырех координационных сфер. Как известно, для обучения требуется большая выборка данных, получить экспериментально которую, как правило, не представляется возможным. В работе проблема больших данных решена путем моделирования набора разнообразных кластеров с помощью Python-библиотеки ASE и теоретического расчета спектров XANES.

Дальнейшее развитие работы предполагается в направлении исследования структурных характеристик биметаллических наночастиц, тестировании модели на экспериментальных данных, а также построении системы автоматической оценки параметров структуры наноматериала с применением комбинации различных экспериментальных данных.

Благодарности. Данное исследование поддержано грантом «Многомасштабная диагностика структуры нанокompозитных материалов, содержащих моно- и биметаллические наночастицы, с использованием алгоритмов машинного обучения» № 18-71-00092 Российского научного фонда.

### Литература

1. Guterman V.E., Alekseenko A.A., Volochaev V.A., Tabachkova N.Y. Synthesis of nanostructured Pt/C electrocatalysts and effects of ambient

- atmosphere composition and an intermediate support on their microstructure *Inorg. Mater.*, 2016, 52, 23-28.
2. Manukyan A.S., Avakyan L.A., Elsukova A.E., Zubavichus Y.V., Sulyanov S.N., Mirzakhanyan A.A., Kolpacheva N.A., Spasova M., Kocharian A.N., Farle M., Bugaev L.A., Sharoyan E.G. Formation of nickel nanoparticles and magnetic matrix in nickel phthalocyanine by doping with potassium *Mater. Chem. Phys.*, 2018, 214, 564-571.
  3. Heinz M., Srabionyan V.V., Bugaev A.L., Pryadchenko V.V., Ishenko E.V., Avakyan L.A., Zubavichus Y.V., Ihlemann J., Meinertz J., Pippel E., Dubiel M., Bugaev L.A. Formation of silver nanoparticles in silicate glass using excimer laser radiation: Structural characterization by HRTEM, XRD, EXAFS and optical absorption spectra *J. Alloys Compd.*, 2016, 681, 307-315.
  4. Avakyan L.A., Heinz M., Skidanenko A.V., Yablunovskiy K.A., Ihlemann J., Meinertz J., Patzig C., Dubiel M., Bugaev L.A. Insight on agglomerates of gold nanoparticles in glass based on surface plasmon resonance spectrum: Study by multi-spheres T-matrix method *J. Phys.: Condens. Matter*, 2017, 30, 045901-045909.
  5. Pankhurst Q.A., Connolly J., Jones S.K., Dobson J. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2003, 36, R167.
  6. Qian X.-M., Nie S.M. Single-molecule and single-nanoparticle SERS: from fundamental mechanisms to biomedical applications *Chem. Soc. Rev.*, 2008, 37, 912-920.
  7. J. Timoshenko, D. Lu, Y. Lin, and A.I. Frenkel, *J. Phys. Chem. Lett.* 8, 5091 (2017).
  8. E. Stern, in *X-Ray Absorption: Principles, Applications, Techniques of EXAFS, SEXAFS, and XANES*, edited by D. Koningsberger and R. Prins (John Wiley and Sons, New York, NY, 1988), Chap. 1, p. 3.

## ТГц ИЗЛУЧЕНИЕ НА МАССИВАХ НАНОПРОВОЛОК

Шаталов А.С.

*НИИ ВШЭ, Москва, Россия**E-Mail: shura\_shatalov@inbox.ru*

В последнее время большой интерес как исследователей, так и практиков, вызывают наноразмерные структуры, в частности- массивы одномерных структур – металлических нанопроволок (НП). Часто такие структуры получают методом матричного синтеза, принцип которого заключается в электрохимическом (гальваническом) заполнении пор матрицы (темплата) металлом. Метод даёт возможность получения, в частности, НП, состоящих из чередующихся слоёв различных металлов. Такие структуры, включающие переходы между двумя магнитными представляют интерес для электроники и спинтроники. Известно, что контакт двух магнитных металлов может использоваться как излучатель электромагнитных волн. Принцип действия такого излучателя заключается в прохождении спин-поляризованного тока через границу различных ферромагнитных металлов. Поскольку равновесная поляризация и энергия электронов в металлах отличаются, протекание тока (спин-поляризованного в одном из металлов (инжекторе)) через такой переход приводит к возбужденному состоянию электронов. Релаксация последнего приводит к испусканию электромагнитного излучения, часто приходящегося на ТГц диапазон.

В настоящей работе для получения гетрероструктурных НП применялся традиционный «однованный» метод, при этом использовался импульсный режим электроосаждения. Был успешно использован и «двухванный» метод, который заключается в последовательном росте двух разных металлов в двух разных электролитах: Получены массивы НП из комбинации металлов Ni/Co, Co/Ni, Ni/Fe и Fe/Co. Гетеропереходы были получены и другим методом: каналы трековых мембран полностью заполнялись ме-

таллом (инжектором), а на поверхность наносился тонкий слой другого металла (рабочий слой). При этом использовалось магнетронное нанесение металла, толщина которого должна быть достаточной для пропускания тока высокой плотности и в тоже время слой должен быть прозрачным для ТГц излучения.

Излучательные характеристики полученных образцов были исследованы на двух приборах на оптоакустическом преобразователе (ячейка Голя- приёмник излучения диапазон измерений: терагерцовое и ближнее ИК-излучение) и на Фурье спектрометре Vertex 80v при комнатной температуре. Получены спектры испускаемых электромагнитных излучений, показана возможность генерации электромагнитных волн в диапазоне 10-15 ТГц при мощности до 10 мкВт.

### Литература

1. Елисеев А., Сеницкий А. Философия наносинтеза // Наноазбука. — М., 2008.
2. Lupu N. Electrodeposited NWs and Their Applications, InTech, Rijeka, Croatia, 2010.
3. Vazquez M. (editor). Magnetic Nano- and Microwires, Woodhead, Elsevier, 2015.
4. Ю.В.Гуляев, П.Е.Зильберман, Э.М.Эпштейн, Р. Дж.Элиот. Инжекция спинов током в магнитных переходах металл-металл// Радиоэлектроника, 2003, т.48,№9,с.1030 – 1044.
5. К.В.Фролов, Д.Л. Загорский, И.С.Любутин, В.В.Коротков, С.А.Бедин, С.Н.Сульянов, В.В.Артемов, Б.В.Мчедлишвили. Синтез, фазовый состав и магнитные свойства нанопроволок железа, полученных в порах полимерных трековых мембран. //Письма в ЖЭТФ, 2014, т. 99, вып. 10, с. 656 – 663.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ КЛАСТЕРОВ, ВСТРОЕННЫХ В КРИСТАЛЛ ДЛЯ СОЕДИНЕНИЙ ИТТЕРБИЯ

Шахова В.М.<sup>1,2</sup>, Ломачук Ю.В.<sup>2</sup>, Мальцев Д.А.<sup>2</sup>, Мосягин Н.С.<sup>2</sup>, Скрипников Л.В.<sup>2</sup>, Зайцевский А.В.<sup>2,3</sup>, Титов А.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>СПбГУ, физический факультет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>ПИЯФ имени Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт»,  
Гатчина, Россия

<sup>3</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: verahcnkrf@gmail.com

Методика теоретического изучения материалов является мощным инструментом в решении многих как научных, так и практических задач, особенно проблемы иммобилизации радиоактивных отходов. Однако исследование различных свойств материалов, содержащих f-элементы, представляет из себя сложную квантовохимическую проблему из-за слишком жестких требований для рассмотрения корреляционных и релятивистских эффектов, специфичных для f-элементов и их соединений.

В данном исследовании трудности были преодолены с использованием разработанной нами методики построения оптимальных кластеров, встроенных в кристалл, и потенциала внедрения, описывающего взаимодействие кластера с окружающей средой. Модель встроенного кластера должна точно описывать электронную плотность в интересующей нас области, а также воспроизводить структурные параметры исходного кристалла. Кроме того, нами был применен двухэтапный метод расчета соединений тяжелых атомов. Первый этап – вычисление электронной структуры с помощью точной версии релятивистского псевдопотенциала для тяжелых атомов [1]. Второй – апостериорное восстановление волновых функций вблизи ядра тяжелого атома в интересующей нас области [2]. В результате получена матрица плотности, локализованная на тяжелом атоме, которая позволяет вычислять нужные свойства.

Были рассмотрены кристаллы иттербия: фториды, YbF<sub>2</sub> и YbF<sub>3</sub>, хлориды, YbCl<sub>2</sub> и YbCl<sub>3</sub> (имеющие ионно-ковалентную связь), и алюминиды, YbAl<sub>2</sub> и YbAl<sub>3</sub> (имеющие интерметаллическую связь). Их кластерные модели были изучены в рамках DFT.

Структурные параметры были оптимизированы. Химические сдвиги рентгеновского эмиссионного спектра на атоме иттербия (ХС РЭС) были оценены по методике, разработанной ранее [3]. Результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными, что доказывает перспективность предложенной методики расчета.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 014-31-00022).

### Литература

1. Mosyagin, N.S.; Zaitsevskii, A.V.; Titov, A.V. Shape-Consistent Relativistic Effective Potentials of Small Atomic Cores, *International Review of Atomic and Molecular Physics // Review of Atomic and Molecular Physics*. 2010, №1(1). p. 63-72.
2. Titov, A.V.; Mosyagin, N.S.; Petrov, A.N.; Isaev, T.A.; DeMille, D.P. Study of P,T-parity Violation Effects in Polar Heavy-Atom Molecules // *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*. 2006, №15. p. 253-283.
3. Lomachuk, Yu.V.; Titov, A.V. Method for Evaluating Chemical Shifts of X-ray Emission Lines in Molecules and Solids // *Physical Review A*. 2013, №88. p. 062511.

## ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА МАГНИТНОЕ СОСТОЯНИЕ ТРИГОНАЛЬНЫХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКОВ

Шенгоф Я.А.

*Филиал МГУ имени М.В. Ломоносова, Севастополь, Россия*

*E-mail: yanich0102@yandex.ru*

Объектом исследования настоящей работы являются тригональные антиферромагнетики (рассматриваются кристаллы бората железа,  $\text{FeBO}_3$ ). Эти материалы интересны тем, что обладают рядом свойств различной природы, которые позволяют использовать их в твердотельной электронике. В работе будут рассмотрены магнитоупругие свойства бората железа, обуславливающие значительное влияние высокого квазигидростатического давления на магнитное состояние – изменение ориентации вектора антиферромагнитного момента по отношению к тригональной оси, что наблюдалось методом нейтронной дифракции [1].

В качестве модели квазигидростатического давления было принято гидростатическое давление с одноосной компонентой. Выражения для термодинамических потенциалов с учетом симметрии кристалла имеют следующий вид [2]:

$$F_e = \frac{1}{4}(C_{11} + C_{12})(u_{xx} + u_{yy})^2 + \frac{1}{2}C_{66}((u_{xx} - u_{yy})^2 + 4u_{xy}^2) + \frac{1}{2}C_{33}u_{zz}^2 + 2C_{44}(u_{xz}^2 + u_{yz}^2) + C_{13}(u_{xx} + u_{yy})u_{zz} + 2C_{14}((u_{xx} - u_{yy})u_{yz} + 2u_{xy}u_{xz}) + p_h(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) + p(u_{xx} \cos^2 \gamma_1 + u_{yy} \cos^2 \gamma_2 + u_{zz} \cos^2 \gamma_3 + 2u_{xy} \cos \gamma_1 \cos \gamma_2 + 2u_{xz} \cos \gamma_1 \cos \gamma_3 + 2u_{yz} \cos \gamma_2 \cos \gamma_3)$$

$$F_m = \frac{1}{2}Em^2 + \frac{1}{2}a \cos^2 \theta + \frac{1}{2}bm_z^2 + D \sin \theta (m_y \cos \varphi - m_x \sin \varphi)$$

$$F_{me} = \frac{1}{2}(B_{11} + B_{12})(u_{xx} + u_{yy}) \sin^2 \theta + \frac{1}{2}B_{66}(2u_{xy} \sin 2\varphi + (u_{xx} - u_{yy}) \cos 2\varphi) \times \sin^2 \theta + B_{13}u_{zz} \sin^2 \theta + B_{33}u_{zz} \cos^2 \theta + B_{31}(u_{xx} + u_{yy}) \cos^2 \theta + 2B_{14}(u_{xz} \sin 2\varphi + u_{yz} \cos 2\varphi) \sin^2 \theta + B_{41}((u_{xx} - u_{yy}) \sin \varphi + 2u_{xy} \cos \varphi) \sin 2\theta + B_{44}(u_{xz} \cos \varphi + u_{yz} \sin \varphi),$$

где  $F_e$ ,  $F_m$  и  $F_{me}$  – упругая, магнитная и магнитоупругая компоненты термодинамического потенциала соответственно;  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  – направляющие углы оси давления;  $\theta$  и  $\varphi$  – сферические углы вектора антиферромагнетизма  $\mathbf{l}$ ;  $u_{mn}$  – тензор деформации.

Минимизируя термодинамический потенциал по сферическим углам, можно определить ориентацию вектора антиферромагнетизма при различных ориентациях аксиальной компоненты давления. Мы получили, что в случае  $p \parallel x$  вектор  $I$  ориентируется параллельно оси давления, а значит остается в базисной плоскости  $xy$ . Если  $p \parallel y$ , то АФ вектор лежит в плоскости симметрии  $m_{yz}$  и выходит из базисной плоскости. Когда же  $p \parallel z$ , вектор  $I$  остается в легкоплоскостном состоянии. Построенная теория качественно согласуется с результатами эксперимента [1].

#### Литература

1. Глазков В.П., Кичанов С.Е., Козленко Д.П., Савенко Б.Н., Соменков В.А. Изменение магнитной структуры  $FeVO_3$  при высоких давлениях // Письма в ЖЭТФ. - 2002. - Т.76-№4.-С.251-253.
2. Стругацкий М.Б. Магнитные состояния бората железа в условиях высокого гидростатического давления с аксиальной компонентой // Ученые записки Таврического Национального Университета. - 2006. - Т.19(58). - №1. - С.96 - 99.

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНОИДОВ

Шурыгин А.В., Вовна В.И., Короченцев В.В.

*Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия*  
*E-mail: shurygin.av@dvfu.ru*

Аддукты лантаноидов обладают уникальными фотофизическими свойствами и активно исследуются экспериментальными и теоретическими методами. Соединения аддуктов лантаноидов являются эффективными люминесцентными допантами для получения светотрансформирующих материалов, применяются в датчиках обнаружения низкого содержания воды в этаноле, в полноцветных перестраиваемых люминесцентных лиотропных жидких кристаллах. Используются в медицине для лечения нарушений плотности костей и биохимическом анализе. Важнейшим свойством аддуктов лантаноидов является люминесценция – лиганды, выступая в качестве антенн, поглощают световую энергию, затем в результате внутримолекулярного переноса, передают ее на резонансные уровни иона лантанида, вызывая люминесценцию.

В качестве дополнительных лигандов для трис-хелатных комплексов лантаноидов выступают многие нейтральные молекулы: 1,10-фенантролин (Phen), дипиридил (Dip), дифенилгуанидин (DphGu), трифенилфосфиноксид (TRPO), гексаметилтриамидофосфат (HMPA), которые определяют области поглощения и эффективность люминесценции.

В этой работе исследуется электронная структура двух аддуктов с формулой  $Eu(hfac)_3(L)_2$  образованных трехвалентным комплексом  $Eu(hfac)_3$  и молекулами  $L=$  HMPA (A1), TRPO (A2) (рисунок 1). Представляет интерес определить влияние молекул TRPO и HMPA на структуру электронных уровней комплекса, выявить различия между двумя аддуктами, оценить эффективность переноса энергии с лигандов на металл. В качестве экспериментальных методов использовались УФ фотоэлектронная спектроскопия паров с излучением HeI (21,2 eV), рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия конденсированной фазы с излучением MgK $\alpha$  (1253,6 eV). Теоретические исследования проводилось с использованием квантово-химических вычислений в рамках теории DFT.

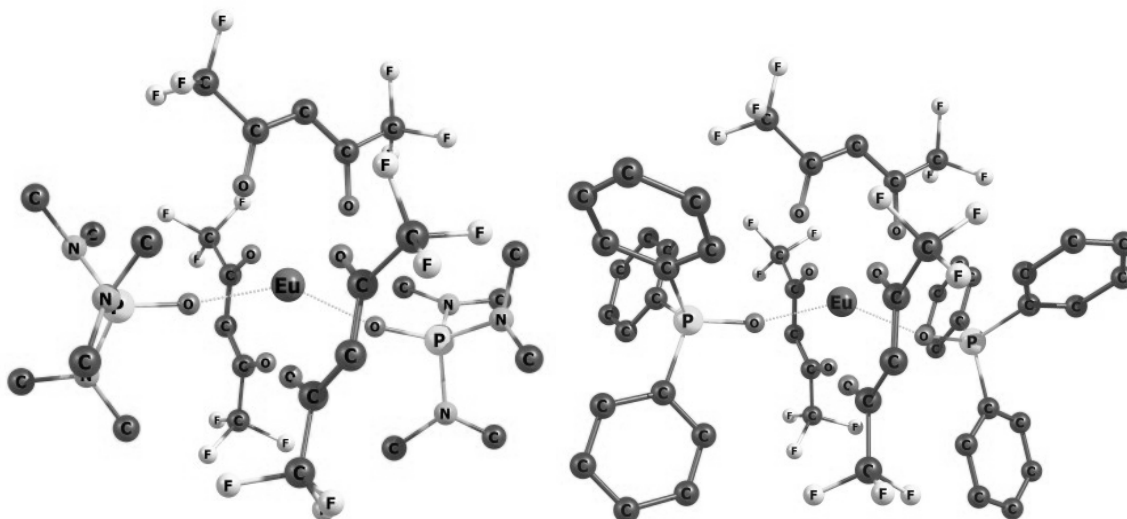


Рис.1. Расчетная структура исследуемых аддуктов в транс-форме.

Проведенное исследование с использованием экспериментальных УФЭС, РФЭС и теоретических DFT методов позволило показать различия в структуре электронных уровней и распределение атомных зарядов для двух аддуктов с разными нейтральными молекулами. Впервые интерпретированные УФЭ спектры позволили показать сдвиги полос  $\text{Eu}(\text{hfac})_3$ , НМРА, ТРРО при аддуктообразовании. Величина и направление экспериментальных сдвигов подтверждают теоретические результаты. Данные значений энергетической щели НОМО – LUMO, положения и локализация вакантных уровней дают представление об области оптического поглощения и, как следствие, различной эффективности при переносе энергий с занятых на вакантные орбитали при возбуждении. Так, большая область поглощения формируется в соединении с молекулами ТРРО, а при добавлении молекулы НМРА мы наблюдаем меньшую энергетическую щель. Замена атома О на S в лиганде НМРА уменьшает энергетическую щель до 3,0 эВ, не меняя структуру LUMO. Переход от трис- $\beta$ -дикетонатов лантаноидов к их аддуктам с мощными антенными лигандами, мы наблюдаем увеличение ширины области поглощения и уменьшение энергетической щели НОМО-LUMO что вносит вклад в рост эффективности переноса энергии возбуждения с лиганда на металл.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Государственного задания по НИР № 3.2168.2017/4.6 Дальневосточного федерального университета.



## СОДЕРЖАНИЕ

### ФИЗИКА ТВЕРЖОГО ТЕЛА

Investigation of the destruction process of materials by electro-physical non-destructive testing and diffraction of thermal neutrons.....	830
Ayman A.A.G., Surin V.I., Bokuchava G.D., Papushkin I.V.	
Исследование термических свойств интеркалята $GA_{0.5}IN_{1.5}S_3 \cdot 0.5 NH_2C_5H_4N$ ромбической сингонии.....	831
Рагимли А.Б.	
Исследование влияния толщины CIGS на эффективность солнечных элементов CIGS/Si с помощью SCAPS-1D.....	833
Тураев Ф.Ш., Жураев Х.Н., Тураев З.Г.	
Исследование пространственного распределения фотолюминесценции электронно-дырочной системы в гетероструктуре Si/SiGe/Si с двумя квантовыми ямами .....	836
Акмаев М.А.	
Исследование сварных соединений образцов из сталей методами радиографического и электрофизического неразрушающего контроля.....	838
Алвахеба А.И., Бекетов В.Г., Гальчин А.В., Иванов О.В., Иванова Т.Е., Сурин В.И.	
Тепловое расширение в сплавах системы $(Tb_{1-x}Y_x)_{0,8}Sm_{0,2}Fe_2$ .....	838
Алероева Т.А., Алероев А.А.	
Динамика парамагнитных центров в наногетероструктурах $TiO_2/MoO_3/V_2O_5$ .....	840
Аллахвердиев М.А.	
Спектральный ИК анализ тонких пленок фуллерена .....	841
Арутинов Н.Э., Гурченко В. С.	
Исследования монет средневековой Волжской Болгарии методами нейтронной дифракции и томографии .....	843
Бакиров Б.А., Кичанов С.Е., Козленко Д.П., Белушкин А.В., Храменкова Р.Х.	
Особенности дифракции кругополяризованного синхротронного излучения в кристаллах.....	844
Баконин Р.Д.	
Соотношение аморфных и кристаллических фаз в пленках SIPOS с различным содержанием кислорода по данным Raman-спектроскопии.....	845
Барков К.А., Голощاپов Д.Л., Ивков С.А.	
Исследование влияния L-аргинина гидрохлорида на характеристики композиционных материалов на основе гидроксиапатита кальция .....	847
Бартенев В.Н.	
Механизм преобразования ферроцена в наночастицы карбидов железа, инкапсулированные в углеродные оболочки, под действием высоких давлений и температур.....	849
Баскаков А.О., Старчиков С.С.	
Локальная атомная структура активных центров меди в цеолитах Cu-MOR, полученных методом твердофазного ионного обмена, по данным EXAFS.....	850
Бдоян К.Э., Раздоров В.Н., Ермакова А.М., Дурьманов В.А., Авакян Л.А., Сухарина Г.Б., Прядченко В.В.	
Исследование наноматериала бактериоферритина Dps методами электронной микроскопии. 851	
Беликов Е.А., Праслова Н.В., Антипов С.С., Преображенская Е.В., Озолинь О.Н., Куликова Т.В., Пичкур Е.Б., Турищев С.Ю.	
Влияние магнитных полей на магнитоэластический эффект и микроструктуру чистого алюминия .....	852
Белоглазова Н.Д.	
Взаимодействие атомов иттрия с фуллеренами на поверхности $Si(111)-\alpha\sqrt{3}\times\sqrt{3}-Au$ .....	854
Бондаренко С.В.	

Особенности тонкой структуры спектров XANES К-краев 3d-металлов в гранулах композитных слоев аморфных многослойных наноструктур $[(\text{CoFeB})_{60}\text{C}_{40}/\text{SiO}_2]_{200}$ и $[(\text{CoFeB})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{C}]_{46}$ .....	856
Буйлов Н.С., Тригуб А.Л.	
Исследование условий возникновения фрактальных кристаллов на поверхности нержавеющей стали.....	858
Бурцев А.А.	
Влияние облучения на свойства поверхности массива из углеродных нанотрубок.....	859
Воробьева Е.А., Шемухин А.А.	
Синтез и газотранспортные параметры мембран, модифицированных пента-разветвленными нанокристаллитами палладия.....	860
Воронин К.А., Луценко И.С., Барышев М.Г., Пушанкина П.Д., Петриев И.С.	
Синтез и исследование структуры и свойств полимеров на основе фуллерена $\text{C}_{60}$ .....	862
Габдуллин Р. Р.	
Исследование эрозии тугоплавких материалов при растрескивании под действием плазмы в термоядерных установках.....	862
Гвоздевская Д.С., В. П.Будаев	
Магнитные свойства биофункционализированных наноксидов железа методами ЯМР и Мессбауэровской спектроскопии.....	863
Гервиц Н.Е., Ткачев А.В., Журенко С.С., Старчиков С.С.	
Программа вычисления структурной амплитуды.....	864
Германович О.И.	
Мессбауэровские исследования влияния площади поверхности ферригидрита на процесс железоредукции.....	865
Гонтарев И.Ю., Грачева М.А., Антонова А.В.	
Морфология и структура тонких пленок на основе силицидов марганца.....	866
Гончарь Н.А.	
Влияние периода плазменной структуры фотопроводящей антенны на генерацию терагерцевого излучения.....	867
Горбатова А.В., Хусяинов Д.И., Буряков А.М.	
Исследование кристаллизации Si-Au наночастиц.....	868
Гордеев И.С.	
Использование интегральных преобразований для анализа сигналов электрофизической диагностики.....	868
Гошкодеров В.А. Гошкодерова Е.А. Абу Газал А.А. Сурин В.И.	
Сравнительное исследование природных и химически модифицированных цеолитов.....	869
Демьяненко А. В.869	
Исследование роста дендритов при формировании поверхностного сплава Pt/Cu(111).....	870
Докукин С.А.	
Примесная фотопроводимость эпитаксиальных пленок $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ .....	871
Дудин В.С.	
Особенности дефектообразования в кремниевых и углеродных наноструктурах под действием ионного облучения.....	873
Евсеев А.П., Миннебаев Д.К., Кожемяко А.В.	
«In-situ» исследования механизмов токогенерирующих реакций в аноде твёрдооксидного топливного элемента методом спектроскопии комбинационного рассеяния света.....	874
Елисеева Г.М.	
Анизотропия коэффициента поглощения вблизи $L_{23}$ краев поглощения церия в монокристалле $\text{CeCoGe}_3$ .....	875
Еникеев А.И.	

- Мёссбауэровские исследования оксигидрокарбонатов железа, образовавшихся в результате биогенного преобразования железосодержащих соединений ..... 876  
Ермолаев Н.А., Грачева М.А., Трифонова В.К., Антонова А.В.
- Насыщение поглощения в несферических нанокристаллах Cd(Cu)Se при стационарном однофотонном возбуждении экситонов..... 877  
Голинская А.Д., Котин П.А., Жаркова Е.В.
- Молекулярно-динамическое моделирование распыления кристалла молибдена газовыми кластерными ионами аргона И расчёт угловых распределений для распылённых атомов 878  
Завильгельский А.Д., Назаров А.В.
- Расчет зонной структуры Si, C и 3C-SiC методом псевдопотенциала ..... 880  
Абдулвагабов М.Ш., Загиров М.Ю.
- Кванто механический расчет электронной структуры LaScO<sub>3</sub> в рамках теории функционала плотности ..... 880  
Зафари У.
- Изучение особенностей эволюции дислокационной структуры кубического титана в процессе рекристаллизации с использованием дислокационной теории упругих искажений кристаллической решетки ..... 881  
Иванов И.В.
- Высокополевые исследования намагниченности редкоземельных интерметаллидов на основе железа ..... 883  
Иванов Л.А.
- Влияние относительного содержания металлической и диэлектрической компонент на фазовый состав и субструктуру нанокompозитов (Co<sub>45</sub>Fe<sub>45</sub>Zr<sub>10</sub>)<sub>x</sub>(MgF<sub>2</sub>)<sub>100-x</sub> ..... 885  
Ивков С.А., Домашевская Э.П., Ситников А.В., Стогней О.В., Козаков А.Т., Никольский А.В.
- Вычисление электронного спектра TlInS<sub>2</sub> и TlInSe<sub>2</sub> из первых принципов ..... 887  
Ismayilova N.A.
- Исследование микроволнового нагрева композитных материалов..... 888  
Калганов Д.А., Анзулевич А.П.
- Структурно-фазовые и функциональные характеристики титановых покрытий, полученных методом магнетронного распыления ..... 889  
Кашуркин Е.В.
- Резонансно-туннельные структуры из квантовых ям GaAs/AlGaAs для использования в p-i-n фотовольтаических элементах ..... 890  
Клеммер П.С.
- Моделирование стеклования переохлажденного расплава Zr-Nb с помощью метода молекулярной динамики..... 891  
Клявинек С.С.
- Исследование характеристик ударного разрыва полимер-тканевых композитов, армированных углеродными нанотрубками..... 892  
Кобзев В.А., Петров И.С., Панкратов С.А., Михайлов П.О., Лагутин В.Ю.
- Локальные состояния атомов железа в LiFe<sub>0.9</sub>Zn<sub>0.1</sub>PO<sub>4</sub> на разных стадиях электрохимического делитирования ..... 892  
Ковалькова М.В., Востров Н.И., Ярославцев С.А.
- Рентгеноструктурные исследования диффузионных фильтров-мембран ..... 893  
Колесников В.В.
- Фемтосекундная лазерная модификация слоистых структур на основе германия и кремния .. 894  
Колчин А.В., Шулейко Д.В., Кривякин Г.К.
- Анизотропия рассеяния носителей заряда и магнитные фазовые диаграммы в антиферромагнитном металле Ho<sub>0.8</sub>Lu<sub>0.2</sub>B<sub>12</sub>..... 895

Красиков К.М., Краснорусский В.Н., Хорошилов А.Л. Случанко Н.Е. Контроль герметичности и натекания газов и анализ испаряемых частиц в дугогасительных камерах квадрупольным масс-спектрометром .....	897
Кудюкин А.И. Исследование структуры поливинилхлорида, подвергнутого фотодеструкции, методом спектроскопии комбинационного рассеяния света: эксперимент и квантово-химические расчёты .....	899
Кузнецов С.М., Новиков В.С. ЭПР спектроскопия нанокристаллического диоксида титана с высокой степенью фотокаталитической активности .....	901
Кушников М.П., Трусов Г.В. Исследование электрического дипольного спинового резонанса для состояний мелкого донора в нанопроволоке .....	902
Лаврухина Е.А. Влияние высокого давления на кристаллическую структуру кобальтита $\text{LaSrCoO}_4$ .....	904
Лис О.Н., Кичанов С.Е., Козленко Д.П., Белушкин А.В., Савенко Б.Н. Исследование свойств ксенотима $\text{YPO}_4$ в рамках метода встроенного кластера .....	905
Ломачук Ю.В., Мальцев Д.А., Мосягин Н.С., Зайцевский А.В., Титов А.В. Формирование центров окраски германий-вакансия (GeV) при синтезе алмаза в СВЧ плазме	906
Мартьянов А.К. Моделирование атомной структуры в окрестности нанопор и оценка скорости перемещения элементов поверхности нанопор в оцк и гцк металлах .....	908
Мельников А.П. Угловое распределение эмитированных частиц при ионном облучении .....	908
Мерзук Б., Миннебаев Д.К., Данилов А.В., Шемухин А.А. Исследование дефектообразования в графене на медной подложке .....	910
Миннебаев Д.К., Евсеев А.П., Мерзук Б., Завильгельский А.Д., Шемухин А.А. Термодинамическая стабильность твердых растворов $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{BaGa}_2\text{S}_4)_{1-x}$ и $(\text{CaGa}_2\text{S}_4)_x(\text{CaAl}_2\text{S}_4)_{1-x}$ .....	911
Нагиев Т.Г., Асадов Э.Г. Влияние чужеродных атомов на электронную структуру бор-азотные нанотрубки .....	912
Нематов Д.Д. Получение и исследование биоконпозитов на основе нанокристаллического гидроксиапатита кальция/L-лизина гидрохлорида .....	914
Никитков К.А. Электрохимический синтез графена в сверхкритическом электролите .....	916
Никифоров А.А., Сюй С. Структурные фазовые переходы в лангаситах $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ и $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ при высоких давлениях до 60 ГПа Никифорова Ю.А., Старчиков С.С., Аксёнов С.Н. ....	917
Исследование механизмов формирования светоизлучающей гексагональной фазы 9R-Si .....	918
Никольская А.А., Королев Д.С., Михайлов А.Н., Белов А.И., Конаков А.А., Чигиринский Ю.И., Сушков А.А., Павлов Д.А., Тетельбаум Д.И. Моделирование спектров комбинационного рассеяния нормальных алканов и каротиноидов методом функционала плотности .....	919
Новиков В.С., Кузнецов С.М. Эффекты динамического отжига ионно-индуцированных радиационных нарушений в алмазе .....	921
Овчинников М.А.	

Морфология магнитных многослойных наноструктур $[(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{In}_2\text{O}_3/\text{C}]_{46}$ и $[(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{ZnO}/\text{C}]_{46}$ .....	923
Пешков Я.А., Юраков Ю.А., Ситников А.В.	
Исследования поверхности и объемной части массивов кремниевых нанонитей синхротронным методом спектроскопии XANES .....	924
Пислярук А.К., Паринава Е.В., Коюда Д.А., Сиваков В., Турищев С.Ю.	
Two-dimensional magnetoexcitons with linear dispersion law .....	925
Podlesny I.V.	
Рентгеноспектральные исследования планарно-осажденного гибридного наноматериала на основе бактериоферритина Dps .....	926
Праслова Н.В., Паринава Е.В., Чувенкова О.А., Антипов С.С., Коюда Д.А., Преображенская Е.В., Беликов Е.А., Озолинь О.Н., Домашевская Э.П., Чумаков Р.Г., Турищев С.Ю.	
О корреляции структурных и магнитных свойств легированных манганитов лантанов $\text{La}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ (A=Ca, Sr).....	927
Пчелина Д.И.	
Исследование механизмов встраивания азота в углеродные структуры .....	928
Рогатнев С.С., Евлашин С.А.	
Особенности структуры и трибологическое поведение хром-наноалмазных покрытий, полученных методом магнетронного распыления.....	929
Рэйляну М.Д.	
Влияние отжига на электрические, фотоэлектрические и оптические свойства полимера – производного полифенилхинолина .....	931
Сайтов Ш.Р., Амасев Д.В.	
Исследование магнитных свойств $\text{TmFe}_{11}\text{Ti}$ , его гидрида и нитрида в сильных магнитных полях .....	933
Сладков А.Д.	
Поляризационный анализ в мёссбауэровской рефлектометрии для выявления антиферромагнитных фаз в поверхностном слое $[\text{Fe}(10\text{ML})/\text{V}(10\text{ML})]_{20}$ .....	935
Слинько О.В., Баулин Р.А.	
Исследование изменений физических свойств в коллиматоре молибден-алмаз $\text{MoCuCD}$ , облученном 35 МэВ пучком протонов.....	936
Случевский А.Ю., Рязанов А.И.	
Фоточувствительный сенсор для ближнего инфракрасного диапазона на основе $\text{InP}/\text{InGaAs}$ фотокатода .....	938
Смирнов К.Я.	
Угловая и дозовая зависимость коэффициента распыления кремния фокусированным ионным пучком галлия.....	939
Смирнова М.А., Пухов Д.Э., Бачурин В.И.	
Рентгеноструктурные и мёссбауэровские исследования монокристаллов на основе тригональных ферроборатов .....	940
Снегирёв Н.И., Селезнева К.А., Могиленец Ю.А., Смирнова Е.С., Старчиков С.С.	
Структура и свойства кристаллов силицида кобальта, полученных путем сплавления двух фаз.....	941
Сорокина А.Е.	
Структурные, магнитные и электронные свойства мультиферроика семейства лангасита $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ при высоких давлениях до 70 ГПа по данным синхротронной Мёссбауэровской спектроскопии .....	942
Старчиков С.С., Никифорова Ю.А., Аксёнов С.Н.	
Влияние пьезоэффекта на проводимость низкоразмерной структуры .....	944
Степушкин М.В.	

Теоретическое исследование механических свойств поликристалла алмаза, состоящего из зерен, соединённых через границы раздела со структурой лонсдейлита.....	944
Суханова Е.В.	
Структура и магнитокалорические свойства соединения $(\text{Tb}_{0.3}\text{Dy}_{0.7})\text{Co}_2$ и его гидрида.....	946
Трушева А.С.	
Температурная зависимость примесной фотопроводимости твердых растворов $\text{CdHgTe}$ .....	947
Уаман Светикова Т.А.	
Монослойные органические полевые транзисторы на основе тиофен-фениленовых соолигомеров.....	949
Федоренко Р.С.	
Структурная и магнитная эволюция нанокмозитов типа «ядро-оболочка» $\text{Fe}_x\text{O}_y@C$ , полученных методом одностадийного термического пиролиза.....	950
Фунтов К.О., Старчиков С.С., Баскаков А.О.	
Концентрационная зависимость поверхностного натяжения расплавов на основе щелочных металлов.....	952
Хазбулатов З.Л.	
Структурные исследования железо-никелевых и медно-кобальтовых нанопроволок.....	953
Хечумян С.А.	
Рассеяние электронов на прямоугольном потенциальном барьере в нодальном полуметалле.	955
Хохлов Д.А.	
Особенности электроосаждения металла в поры трековой мембраны в магнитном поле и структура получаемых нанопроволок.....	957
Черкасов Д.А.	
Исследование диэлектрического отклика гексаферритов М-типа $\text{Ba}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$ в терагерцовом-инфракрасном диапазоне частот.....	959
Чечёткин А.В.	
Исследование структуры монометаллических наночастиц с использованием алгоритмов машинного обучения.....	960
Шагинян А.Л., Прядченко В.В., Раздоров В.Н., Авакян Л.А.	
ТГц излучение на массивах нанопроволок.....	961
Шаталов А.С.	
Моделирование кластеров, встроенных в кристалл для соединений иттербия.....	962
Шахова В.М., Ломачук Ю.В., Мальцев Д.А., Мосягин Н.С., Скрипников Л.В., Зайцевский А.В., Титов А.В.	
Влияние давления на магнитное состояние тригональных антиферромагнетиков.....	963
Шенгоф Я.А.	
Электронная структура и оптические свойства комплексов лантаноидов.....	964
Шурыгин А.В., Вовна В.И., Короченцев В.В.	